

VT-Forschungsbericht 2018-03

Numerische Simulation von Raketen- brennkammern mit transkritischer Einspritzung

Dipl.-Ing. Martin Seidl

Deutsches Zentrum für Luft- und Raumfahrt
Institut für Verbrennungstechnik
Stuttgart



DLR

Deutsches Zentrum
für Luft- und Raumfahrt



Herausgeber

Deutsches Zentrum
für Luft- und Raumfahrt

**Institut für
Verbrennungstechnik**

Pfaffenwaldring 38-40
70569 Stuttgart

Telefon
Telefax

(0 7 11) 68 62 - 3 08
(0 7 11) 68 62 - 5 78

Als Manuskript gedruckt.
Abdruck oder sonstige Verwendung
nur nach Absprache mit dem Institut gestattet

D93, Stuttgart

Numerische Simulation von Raketenbrennkammern mit transkritischer Einspritzung

Von der Fakultät für Luft- und Raumfahrttechnik und Geodäsie
der Universität Stuttgart zur Erlangung der Würde eines
Doktors der Ingenieurwissenschaften (Dr.-Ing.)
genehmigte Abhandlung

vorgelegt von

Dipl.-Ing. Martin Seidl

aus Deggendorf

Hauptberichter:	apl. Prof. Dr.-Ing. Peter Gerlinger
1. Mitberichter:	Prof. Dr. rer. nat. Michael Pfitzner
2. Mitberichter:	Prof. Dr. rer. nat. Uwe Riedel

Tag der mündlichen Prüfung: 22. Juni 2018

Institut für Verbrennungstechnik der Luft- und Raumfahrt
Universität Stuttgart

Danksagung

Die vorliegende Arbeit entstand im Rahmen meiner wissenschaftlichen Tätigkeit am Institut für Verbrennungstechnik in der Abteilung Computer Simulation des Deutschen Zentrums für Luft- und Raumfahrt e. V. (DLR) in Stuttgart.

Zunächst möchte ich mich bei meinem Hauptberichter und Betreuer Herrn apl. Prof. Dr.-Ing. Peter Gerlinger bedanken, der mir das Anfertigen dieser Arbeit ermöglichte. Seine Erfahrung und seine fachliche Kompetenz auf dem Gebiet der numerischen Verbrennungssimulation waren stets eine große Hilfe.

Weiterhin gilt mein Dank Herrn Prof. Dr. rer. nat. Michael Pfitzner sowie Herrn Prof. Dr. rer. nat. Uwe Riedel für die Übernahme des Mitberichts sowie die gründliche Durchsicht des Manuskripts.

Bei Herrn Dmitry Suslov sowie allen weiteren mitwirkenden Kollegen am DLR Standort Lampoldshausen möchte ich mich für das Überlassen von experimentellen Messdaten bedanken.

Meinen ehemaligen Kollegen Roman Keller, Felix Grimm, Bastian Rauch, Markus Lempke und Yann Hendrik Simsont möchte ich für die sehr gute Zusammenarbeit sowie das sehr angenehme Miteinander im Büro danken.

Nicht zuletzt möchte ich mich bei meiner gesamten Familie für die stete Unterstützung und den großen Rückhalt zu allen Zeiten meines Lebens bedanken. Einen Ehrenplatz auf dieser Seite möchte ich zum Schluss noch meiner Schwester Aileen widmen.

Deggendorf, Juli 2018

Inhaltsverzeichnis

Nomenklatur	6
Abbildungsverzeichnis	17
Tabellenverzeichnis	18
Kurzfassung	19
Abstract	21
1 Einleitung	23
1.1 Einführung	23
1.2 Ziel der Arbeit und Übersicht	27
2 Thermodynamische Grundlagen	28
2.1 Verhalten und Vorhersage realer Reinstoffe	29
2.2 Verhalten und Vorhersage realer Mischungen	33
2.3 Zustandsgleichungen	37
2.3.1 Kubische Zustandsgleichungen für Reinstoffe	38
2.3.2 Kubische Zustandsgleichungen für Mischungen	40
2.3.3 Bestimmung des molaren Volumens	42
2.4 Thermodynamische Formeln und Begriffe	43
2.4.1 Thermodynamische Beschreibung idealer Gase	44
2.4.2 Thermodynamische Beschreibung realer Fluide	47
2.4.2.1 Thermodynamische Potentiale	48
2.4.2.2 Residuumsfunktionen	49
2.4.2.3 Partielle Größen	51
2.4.2.4 Chemisches Potential, Fugazitäten und Fugazitätskoeffizienten	52
2.4.2.5 Abgeleitete Größen aus der reduzierten Helmholtz-Residuumsfunktion	52
2.4.2.6 Partielle Ableitungen der reduzierten Helmholtz-Residuumsfunktion	54
2.5 Stoffwerte	56

2.5.1	Stoffwerte idealer Reinstoffe	58
2.5.1.1	Stoffdaten aus kinetischer Gasttheorie	58
2.5.1.2	Stoffdaten aus experimentellen Fits	59
2.5.1.3	Polynomfits	60
2.5.2	Stoffwerte idealer Gemische	61
2.5.3	Stoffwerte realer Reinstoffe und Gemische	64
3	Gleichungssatz turbulenter, reaktiver Strömungen	70
3.1	Erhaltungs- und Transportgleichungen	70
3.2	Turbulenzmodellierung	75
3.2.1	RANS und URANS	75
3.2.2	Hybrides URANS / LES Verfahren: DDES	76
3.3	Verbrennungsmodellierung	78
4	Numerisches Lösungsverfahren	81
4.1	Präkonditionierung und Zeitintegration	81
4.1.1	Präkonditionierung für stationäre Simulationen	83
4.1.2	Präkonditionierung und Diskretisierung des physikalischen Zeitablei- tungs terms für instationäre Simulationen	90
4.1.3	Implizites Zeitintegrationsverfahren	92
4.1.4	Bestimmung des Zeitschritts	93
4.2	Räumliche Diskretisierung	94
4.2.1	Finite-Volumen Methode	94
4.2.2	Diskretisierung der konvektiven Flüsse	95
4.2.2.1	Polynomrekonstruktion, TVD-Limiter und MLP	96
4.2.2.2	AUSM ⁺ -up Verfahren für reale Fluide	97
4.3	Randbedingungen	100
5	Ergebnisse der CFD Simulationen	102
5.1	Transkritischer N ₂ -Strahl	103
5.1.1	Testfallbeschreibung	103
5.1.2	Numerisches Setup	105
5.1.3	2D-RANS Simulationsergebnisse	107
5.1.4	3D-DDES Simulationsergebnisse	111
5.2	Überkritische CO ₂ -Rohrströmung	117
5.2.1	Testfallbeschreibung	117
5.2.2	Numerisches Setup	122
5.2.3	Simulationsergebnisse	123
5.3	Überkritische H ₂ -O ₂ Verbrennung: Mascotte Brennkammer	128
5.3.1	Testfallbeschreibung	128
5.3.2	Numerisches Setup	130

5.3.3	Simulationsergebnisse	131
5.4	Überkritische H_2 - O_2 Verbrennung: DLR Brennkammer C	137
5.4.1	Testfallbeschreibung	137
5.4.2	Numerisches Setup	138
5.4.3	Simulationsergebnisse	138
6	Zusammenfassung	145
	Literaturverzeichnis	167
A	Helmholtz-Residuumfunktion der SRKmVK Zustandsgleichung	168
B	Lösung kubischer Gleichungen	172
C	Berechnung der Zustandsgleichungsparameter	175
D	Speziesparameter und -stoffdaten	178
E	Herleitungen thermodynamischer Gleichungen	182

Nomenklatur

In Gleichungen gilt die Einstein'sche Summenkonvention. Abweichungen davon werden explizit an entsprechenden Stellen gekennzeichnet.

Lateinische Buchstaben

A	Fläche	m^2
A	Helmholtz-Energie	J
A_r	präexponentieller Faktor in Arrheniusfunktion der r -ten Reaktion	
a	massenspezifische Helmholtz-Energie	J/kg
a_s	isentropische Schallgeschwindigkeit	m/s
\mathcal{A}	stoffmengenbehafteter Zustandsgleichungsparameter	$\text{J} \cdot \text{m}^3$
a	Zustandsgleichungsparameter	$\text{J} \cdot \text{m}^3/\text{mol}^2$
\mathcal{B}	stoffmengenbehafteter Zustandsgleichungsparameter	m^3
b	Zustandsgleichungsparameter (Kovolumen)	m^3/mol
C_{DDES}	Konstante im DDES Modell	-
\mathcal{C}	stoffmengenbehafteter Zustandsgleichungsparameter	m^3
c	Zustandsgleichungsparameter (Korrekturvolumen)	m^3/mol
c	Konzentration	mol/m^3
c_p	massenspezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck	$\text{J}/(\text{kg} \cdot \text{K})$
c_v	massenspezifische Wärmekapazität bei konstantem Volumen	$\text{J}/(\text{kg} \cdot \text{K})$
$D_{\alpha\beta}$	binärer Diffusionskoeffizient	m^2/s
D_α	Diffusionskoeffizient der Mischung	m^2/s
d	Durchmesser	m
d_h	hydraulischer Durchmesser	m
E	innere Energie	J

$E_{A,r}$	Aktivierungsenergie in Arrheniusfunktion der r -ten Reaktion	J/mol
e_{tot}	massenspezifische Totalenergie	J/kg
F_μ, F_λ	Funktionen im Huber-und-Hanley-Modell	—
f	Frequenz	Hz = 1/s
f	Fugazität	Pa = N/m ²
f	Abbildungsfunktion im Huber-und-Hanley-Modell	—
f_β	Modulierungsfunktion in Präkonditionierung	—
f_{a_s}	Modulierungsfunktion im AUSM ⁺ -up Schema	—
f_{DDES}	Überblendfunktion im DDES Modell	—
G	Gibbs-Energie	J
g	massenspezifische Gibbs-Energie	J/kg
g	Erdbeschleunigung	m/s ²
H	Enthalpie	J
h	massenspezifische Enthalpie	J/kg
h_{tot}	massenspezifische Totalenthalpie	J/kg
h	Abbildungsfunktion im Huber-und-Hanley-Modell	—
I_{sp}	spezifischer Impuls	s
j	Diffusionsstrom	kg/(m ² · s)
K	1. Turbulenzvariable (k oder q)	m ² /s ² , m/s
K_c, K_p, K_f	chemische Gleichgewichtskonstante bezogen auf Konzentration, Druck oder Fugazität	
k	(modellierte) turbulente kinetische Energie	m ² /s ²
k_f, k_b	Geschwindigkeitskoeffizienten der Hin- und Rückreaktion	
ℓ	Längenskala	m
M_w	Molekulargewicht	kg/mol
\mathcal{M}^\pm	Skalierungsfunktion im AUSM ⁺ -up Schema	—
m	Masse	kg
\dot{m}	Massenstrom	kg/s
$k_{\alpha\beta}$	binärer Interaktionsparameter	—
$l_{\alpha\beta}$	binärer Interaktionsparameter	—
L	Länge	m
N	Anzahl	—
n	Stoffmenge	mol

n_r	Temperaturfaktor in Arrheniusfunktion der r -ten Reaktion	
\mathcal{O}	Landau-Symbol (Größenordnung)	
\mathcal{P}^\pm	Skalierungsfunktion im AUSM ⁺ -up Schema	—
p	Druck	Pa = N/m ²
q	Turbulenzvariable, $q = \sqrt{k}$	m/s
\dot{q}_w	flächenspezifischer Wandwärmestrom	W/m ²
R	Radius	m
R	spezifische Gaskonstante	J/(kg · K)
R_u	universelle Gaskonstante	J/(mol · K)
r	radiale Koordinate	m
S	Zellseitenfläche, Oberfläche	m ²
S	Entropie	J / K
s	massenspezifische Entropie	J/(kg · K)
T	Temperatur	K
t	Zeit	s
Δu	Diffusionsgeschwindigkeit	m/s
u	Geschwindigkeit in x_1 -Richtung	m/s
u_b	querschnittsgemittelte Axialgeschwindigkeit (engl.: bulk velocity)	m/s
\mathfrak{U}	Skalarprodukt des Geschwindigkeits- und Oberflächenvektors	m ³ /s
\mathfrak{u}	Skalarprodukt des Geschwindigkeits- und Oberflächennormalenvektors $\mathfrak{U} / S $	m/s
V	Volumen	m ³
v	Geschwindigkeit in x_2 -Richtung	m/s
v	massenspezifisches Volumen	m ³ /kg
v_m	molares Volumen	m ³ /mol
\acute{v}_m	verschobenes, molares Volumen	m ³ /mol
X	Molenbruch	—
x	Koordinate in x_1 -Richtung	m
x_ℓ	Koordinate in ℓ -Richtung	m
Y	Massenbruch	—
y	Koordinate in x_2 -Richtung	m
y^+	dimensionsloser Wandabstand	—
Z	Kompressibilitätsfaktor	—

Griechische Buchstaben

α	temperaturabhängiger Anteil von ZGL-Parameter a	—
β	Skalierungsfaktor in Prädiktionierung	m^2/s^2
γ	Verhältnis der Wärmekapazitäten c_p/c_v , Isentropenexponent	—
Δ_{g}	Differenz der reduzierten molaren Gibbs-Energie	—
Δ_{DDES}	LES-Filterweite im DDES Modell	m
δ	Schalter für Achsensymmetrie	—
δ_{ij}	Kronecker-Delta	
ϵ	Dissipationsrate der turbulenten kinetischen Energie	m^2/s^3
ϵ/k_{B}	Potentialtopftiefe ϵ normiert mit Boltzmannkonstante k_{B}	—
ε_{α}	Korrekturkonstante in α	—
$\varepsilon_{\beta,r}$	Dreierstoßeffektivität in r -ter Reaktion	—
κ	Parameter in SRK und PR Zustandsgleichung	—
λ	Wärmeleitfähigkeit	$\text{W}/(\text{m} \cdot \text{K})$
$\lambda_{(i)}$	i -ter Eigenwert	(m/s)
μ	dynamische Viskosität	$\text{kg}/(\text{m} \cdot \text{s})$
μ	chemisches Potential	J/mol
ν	Stöchiometriekoeffizient	—
Π	(allgemeines) thermodynamisches Potential	
ρ	(massenspezifische) Dichte	kg/m^3
Σ_{V}	Diffusionsvolumen im Fuller-Modell	—
σ	Stoßdurchmesser	m
τ	Spannungstensor	N/m^2
τ	Pseudo-Zeit	s
φ	Fugazitätskoeffizient	—
ψ	reduzierte molare Helmholtz-Residuumfunktion	—
Ψ	reduzierte Helmholtz-Residuumfunktion	mol
Ω	Zellvolumen	m^3
$\Omega^{(2,2)}$	Stoßintegral	—
ω	Transportgröße der Turbulenz, $\omega \sim \epsilon/k$	1/s
ϖ	azentrischer Faktor	—

Vektoren und Matrizen

$\{\dots\}$	Reihenvektor
\mathbf{Q}_c	konservativer Variablenvektor
\mathbf{Q}_p	primitiver Variablenvektor
\mathbf{F}_ℓ	analytischer Flussvektor in ℓ -Richtung
$\mathring{\mathbf{F}}_\ell$	numerischer Flussvektor im AUSM ⁺ -up Schema in ℓ -Richtung
\mathbf{S}	Quelltermvektor
\mathbb{I}	Präkonditionierungsmatrix
\mathbb{I}	Einheitsmatrix
\mathbb{J}	Jakobimatrix
\mathbb{P}	Präkonditionierer / Präkonditionierungsmatrix
\mathbb{T}	Transformationsmatrix

Dimensionslose Kennzahlen

CFL	Courant-Friedrichs-Lewy-Zahl
CFL_{krit}	maximale CFL-Zahl für stabiles Lösungsverfahren
Ko	Konditionszahl
Ma	Machzahl
Ma_∞	charakteristische Machzahl in Präkonditionierung und AUSM ⁺ -up Schema
Ma^*	Pseudo-Machzahl in Präkonditionierung
Ma_o	limitierte Machzahl in Präkonditionierung und AUSM ⁺ -up Schema
O/F	Verhältnis von Oxidator- zu Brennstoffmassenstrom
Pr	Prandtlzahl
Sc	Schmidtzahl
Tu	Turbulenzgrad

Indizes und Akzente

ϕ'	Integrationsvariable
ϕ^*	Zustand eines hypothetischen, idealen Gases, reduzierte Größe oder Pseudo-Größe
ϕ^\diamond	reduzierte Größe im Huber-und-Hanley-Modell

$\bar{\phi}$	Reynolds-gemittelte Größe
$\tilde{\phi}$	Favre-gemittelte Größe
$\hat{\phi}$	partielle massenbehaftete Größe
$\check{\phi}$	partielle molare Größe
$\phi_{1/2}$	Wert auf Zellseitenfläche / Interface-Wert
a	Umgebung (engl.: ambient)
c	Brennkammer (engl.: combustion chamber)
d	diffusiver Anteil
Dim	Dimension
cr	Wert am thermodynamisch kritischen Punkt
eff	effektive Größe (molekularer + turbulenter Anteil)
eq	equivalente Größe
E	Exzessgröße
Fick	Wert berechnet nach Fick'schem Gesetz
iG	Wert für ideales Gas
in	Wert am Einlass (engl.: inlet)
Inj	Wert im Injektor
k	konvektiver Anteil
kor	korrigierte Größe
L	linksseitiger Wert
M	inertter Stoßpartner in Dreierstoßreaktion
m	molare / molspezifische Größe
R	rechtsseitiger Wert
r	Residuumanteil /-funktion
ref	Referenzwert
t	turbulente Größe
w	Wert an der Wand
0	Referenzzustand (ideales Gas, Referenzfluid etc.)
α, β	Laufindizes für Spezies
ℓ, m, n	Laufindizes für Raumrichtungen
f	Laufindex für Zellseiten

Abkürzungen

AUSM	<u>A</u> dvection <u>U</u> pstream <u>S</u> plitting <u>M</u> ethod
CFD	<u>C</u> omputational <u>F</u> luid <u>D</u> ynamics
DDES	<u>D</u> elayed <u>D</u> etached- <u>E</u> ddy <u>S</u> imulation
DNS	<u>D</u> irekte <u>N</u> umerische <u>S</u> imulation
FRC	<u>F</u> inite- <u>R</u> aten <u>C</u> hemie
iG	<u>i</u> deales <u>G</u> as
KGT	<u>K</u> inetische <u>G</u> ast <u>t</u> heorie
LES	<u>L</u> arge- <u>E</u> ddy <u>S</u> imulation
LHS	<u>L</u> inke- <u>H</u> and- <u>S</u> eite
LOX	flüssiger Sauerstoff (engl.: liquid <u>o</u> xxygen)
LU-SGS	<u>L</u> ower- <u>U</u> pper <u>S</u> ymmetric <u>G</u> auss- <u>S</u> eidel
MLP ^{ld}	<u>M</u> ultidimensional <u>L</u> imiting <u>P</u> rocess <u>l</u> ow <u>d</u> iffusion
MUSCL	<u>M</u> onotonic <u>U</u> pstream-Centered <u>S</u> cheme for <u>C</u> onservation <u>L</u> aws
PR	<u>P</u> eng- <u>R</u> obinson
RANS	<u>R</u> eynolds- <u>A</u> veraged <u>N</u> avier- <u>S</u> tokes
RHS	<u>R</u> echte- <u>H</u> and- <u>S</u> eite
SCWR	<u>S</u> upercritical <u>W</u> ater- <u>C</u> ooled <u>R</u> eactor
SRK	<u>S</u> oave- <u>R</u> edlich- <u>K</u> wong
SRKmVK	<u>S</u> oave- <u>R</u> edlich- <u>K</u> wong <u>m</u> it <u>V</u> olumen <u>K</u> orrektur
TVD	<u>T</u> otal <u>V</u> ariation <u>D</u> iminishing
URANS	<u>U</u> nsteady <u>R</u> ANS
vdW	<u>v</u> an <u>d</u> er <u>W</u> aals
ZGL	<u>Z</u> ustandsgleichung

Abbildungsverzeichnis

1.1	Zunahme von $1 - (p_a/p_c)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}}$ als Maß für die Effizienz eines Raketentriebwerks in Abhängigkeit vom Brennkammerdruck p_c für verschiedene Adiabatenexponenten.	24
1.2	Schattengraphbilder eines turbulenten, kryogenen N_2 -Strahls in einer He-Umgebung bei Raumtemperatur mit unterkritischer (10 bar) (a) und transkritischer (60 bar) (b) Einspritzung (Mayer et al. (1998) [134]).	25
1.3	Schattengraphbilder einer H_2 - O_2 Verbrennung in einer Modellraketenbrennkammer mit einem Koaxialinjektor bei unterkritischer (15 bar) (a) und transkritischer (60 bar) (b) Einspritzung von O_2 (Mayer et al. (1996) [132]). . . .	25
2.1	p - v_m -Diagramm (a) und Kompressibilitätsdiagramm (b) von O_2 berechnet mit der SRK Zustandsgleichung.	30
2.2	ρ - T -Diagramm von O_2 (a) und H_2O (b): Vergleich der SRK Zustandsgleichung (für H_2O auch mit konstanter Volumenkorrektur $c = +1,0 \cdot 10^{-5} \text{ m}^3/\text{mol}$) mit der iG Zustandsgleichung und REFPROP-Korrelationen.	31
2.3	Molare Wärmekapazitäten bei konstantem Druck (a) bzw. Volumen (b) für O_2 : Vergleich der SRK Zustandsgleichung und iG Zustandsgleichung mit REFPROP-Korrelationen.	32
2.4	p - X -Diagramm (a) und p - v_m -Diagramm bei $X_{CH_4} = 0,3$ (b) für eine CH_4 - C_2H_6 Mischung. Vergleich der SRK Zustandsgleichung mit experimentellen Werten entnommen aus Zhang und Duan (2002) [249].	35
2.5	p - X -Diagramm für eine H_2 - N_2 Mischung: Vergleich der SRK Zustandsgleichung mit experimentellen Werten von Streett und Calado (1978) [209]. . . .	36
2.6	Mit SRK Zustandsgleichung berechnetes molares Volumen einer H_2 - N_2 Mischung und Vergleich mit idealer Mischungsregel (a) sowie Vergleich des mit der SRK Zustandsgleichung berechneten Exzessvolumens mit experimentellen Werten (entnommen aus Deiters et al. (1993) [41]) (b).	37
2.7	Mit SRK Zustandsgleichung berechnete molare Enthalpie einer H_2 - N_2 Mischung und Vergleich mit idealer Mischungsregel (a) sowie Vergleich der mit der SRK Zustandsgleichung berechneten Exzessenthalpie mit experimentellen Werten (entnommen aus Deiters et al. (1993) [41]) (b).	38

2.8	α -Funktionen für H_2 und O_2 , deren kombinierte Funktion α_{H_2,O_2} sowie die α -Funktion einer äquimolaren H_2 - O_2 Mischung für die SRK Zustandsgleichung ohne ($\varepsilon_\alpha = 0,0$) und mit ($\varepsilon_\alpha = 10^{-4}$) Korrektur.	42
2.9	Anteil von $H_2^{(p)}$ im thermodynamischen Gleichgewicht in Abhängigkeit der Temperatur nach Häussinger et al. (2000) [71] (a) und Vergleich gefitteter molarer Wärmekapazitäten von $H_2^{(n)}$ und $H_2^{(p)}$ mit Korrelationen von Leachman et al. (2009) [104] (b).	46
2.10	Vergleich gefitteter Werte der Viskositäten (a) und Wärmeleitfähigkeiten (b) von $H_2^{(p)}$ und $H_2^{(n)}$ bei Idealgasbedingungen mit Daten und Korrelationen aus der Literatur (Muzny et al. (2013) [153], Mehl et al. (2010) [137], Guevara et al. (1969) [66], Assael et al. (2011) [2], Saxena und Saxena (1970) [189]) sowie berechneten Werten nach der kinetischen Gastheorie.	60
2.11	Vergleich gefitteter Werte der Viskositäten (a) und Wärmeleitfähigkeiten (b) von O_2 bei Idealgasbedingungen mit Daten und Korrelationen aus der Literatur (Lemmon und Jacobsen (2004) [115], Hanley et al. (1974) [69]) und der NIST Thermo Data Engine Datenbank [157].	61
2.12	Vergleich gefitteter Werte der Viskositäten (a) und Wärmeleitfähigkeiten (b) von H_2O bei Idealgasbedingungen mit Daten aus der NIST Thermo Data Engine Datenbank [157].	62
2.13	Vergleich berechneter und experimenteller Viskositäten einer H_2 - H_2O Mischung (a) sowie Wärmeleitfähigkeiten einer H_2 - N_2 Mischung (b) bei Idealgasbedingungen. Experimentelle Daten wurden Huang et al. (2011) [81] sowie Gray und Wright (1961) [64] entnommen.	62
2.14	Vergleich berechneter und experimenteller binärer Diffusionskoeffizienten einer H_2O - O_2 Mischung (a) und einer H_2 - O_2 Mischung (b) bei Idealgasbedingungen. Experimentelle Daten wurden Walker und Westenberg (1960) [233] entnommen.	63
2.15	Vergleich der mit dem Huber-und-Hanley-Modell (Huber und Hanley (1996) [82]) berechneten Viskositäten (a) und Wärmeleitfähigkeiten (b) von O_2 mit Korrelationen aus REFPROP.	67
2.16	Vergleich berechneter binärer Diffusionskoeffizienten einer CO_2 - C_2H_4 Mischung (a) und einer H_2O - CO_2 Mischung (b) nach den Modellen von Fuller et al. (1966) [55] (für ideale Gase), Riazi und Whitson (1993) [183] sowie Takahashi (1974) [212] mit experimentellen Daten aus Poling (2001) [176] bzw. Xu et al. (2003) [246].	69
4.1	Konditionszahl der Euler-Gleichungen in Abhängigkeit der Machzahl ohne und mit Präkonditionierung (Stoll (2001) [208]).	82
4.2	Links- und rechtsseitige Werte einer Zellseitenfläche.	95

5.1	Simuliertes Gebiet und Positionen für die Temperaturmessungen für den „N ₂ -Strahl“ Testfall.	104
5.2	Dichte (a) und molare Wärmekapazität bei konstantem Druck (b) von N ₂ bei 39,7 bar in Abhängigkeit der Temperatur berechnet mit der idealen Gasgleichung, der SRK Zustandsgleichung, der SRKmVK Zustandsgleichung (nur für die Dichte) und REFPROP.	106
5.3	Dichte- und mit Stromlinien überlagerte Temperaturkonturen der Referenzsimulation für den „N ₂ -Strahl“ Testfall.	108
5.4	Vergleich mit RANS berechneter und gemessener Dichteprofile entlang der Symmetrieachse für den „N ₂ -Strahl“ Testfall: Variation der Einspritztemperatur und der Injektorwandmodellierung (a) sowie des Turbulenzmodells (und der turbulenten Prandtlzahl) bei $T_{\text{Inj}} = 120,9 \text{ K}$ (b) und $T_{\text{Inj}} = 126,9 \text{ K}$ (c).	109
5.5	Vergleich mit RANS berechneter und gemessener radialer Dichteprofile bei $x/d = 5,0$ und $x/d = 25,0$ für den „N ₂ -Strahl“ Testfall.	111
5.6	Verhältnis μ_t/μ (a) und räumliche Dichtegradienten (Schlierenbild) (b) in einem Schnitt durch die Kammer sowie Isokontur der Dichte bei 400 kg/m^3 gefärbt mit dem räumlichen Dichtegradienten (c) in der DDES-3 Simulation für den „N ₂ -Strahl“ Testfall.	113
5.7	Spektrum der turbulenten kinetischen Energie in der Scherschicht in Abhängigkeit der Frequenz mit typischem 5/3- Abfall für die DDES-3 Simulation des „N ₂ -Strahl“ Testfalls.	114
5.8	Vergleich mit RANS und DDES berechneter und gemessener normierter Dichteprofile entlang der Symmetrieachse (zeitlich und in Umfangsrichtung gemittelt) für den „N ₂ -Strahl“ Testfall.	115
5.9	Vergleich mit RANS und DDES berechneter und gemessener normierter Dichteprofile in radialer Richtung bei $x/d = 5,0$ (a) und $x/d = 25,0$ (b) (zeitlich und in Umfangsrichtung gemittelt) für den „N ₂ -Strahl“ Testfall. Legende Abb. 5.8.	116
5.10	Dichte- und Temperaturkonturen der Referenzsimulation für den „CO ₂ -Rohr“ Testfall (x -Achse um Faktor 50 gestaucht).	119
5.11	Dichte (a), molare Wärmekapazität bei konstantem Druck (b), laminare Prandtlzahl (c) sowie molekulare Viskosität und Wärmeleitfähigkeit (d) von CO ₂ bei 90 bar in Abhängigkeit der Temperatur berechnet mit der idealen Gasgleichung, der SRK (in Kombination mit dem Modell von Huber und Hanley (1996) [82]) bzw. der SRKmVK Zustandsgleichung und REFPROP.	120

5.12	Berechnete und gemessene Wandtemperaturen für den „CO ₂ -Rohr“ Testfall. Vergleich verschiedener Gitter (a), Wandwärmestromverläufe und Zustandsgleichungen (b)*, turbulenter Prandtlzahlen (c) und Turbulenzmodelle (d). Experimentelle Daten von Kurganov und Ziegarnik (2005) [101] wurden Löwenberg (2007) [126] entnommen. * Rote Kurve entspricht der Referenzsimulation. Legende gibt Abweichungen zum Referenzsetup aus Tab. 5.7 an.	121
5.13	Vergleich mit verschiedenen Turbulenzmodellen berechneter und gemessener Radialprofile der Axialgeschwindigkeit bei verschiedenen axialen Positionen für den „CO ₂ -Rohr“ Testfall. Experimentelle Daten von Kurganov und Ziegarnik (2005) [101] wurden Löwenberg (2007) [126] entnommen.	122
5.14	Vergleich von Profilen der Axialgeschwindigkeit (a) und der turbulenten Viskosität (b) für verschiedene Gitter am Ende des adiabaten Rohrabschnitts bei $x/d = -2,5$. d_w ist der Abstand zur Wand.	125
5.15	Radialprofile verschiedener Größen in der Referenzsimulation bei $x = 1$ mm für den „CO ₂ -Rohr“ Testfall.	126
5.16	Simuliertes Rechengebiet und -gitter für den „Mascotte A-60“ Testfall.	130
5.17	Dichte von O ₂ und H ₂ ^(p) (a) sowie molare Wärmekapazität bei konstantem Druck von O ₂ (b) bei 65 bar in Abhängigkeit der Temperatur berechnet mit der idealen Gasgleichung, der SRK Zustandsgleichung und REFPROP.	131
5.18	Vergleich der Temperaturkonturen (obige Hälften) sowie der Dichtekonturen überlagert mit Stromlinien (untere Hälften) zwischen Simulationen mit unterschiedlichem Turbulenzmodell und unterschiedlicher turbulenter Prandtl- und Schmidtzahl für den „Mascotte A-60“ Testfall: $q-\omega$, $Pr_t = Sc_t = 0,9$ (a), $q-\omega$, $Pr_t = Sc_t = 0,7$ (b), $k-\omega$ SST, $Pr_t = Sc_t = 0,7$ (c).	134
5.19	Gegenüberstellung der simulierten Temperaturkonturen ($q-\omega$ Turbulenzmodell, $Pr_t = Sc_t = 0,9$) und der gemessenen Intensität der OH*-Konzentrationen I_{OH^*} aus Juniper et al. (2000) [90] für den „Mascotte A-60“ Testfall.	135
5.20	Vergleich der axialen Temperaturprofile auf der Symmetrielinie zwischen verschiedenen Simulationen des „Mascotte A-60“ Testfalls mit (a) und ohne (b) Düse und experimentellen Messwerten entnommen aus Benarous und Liazid (2009) [11].	135
5.21	Vergleich der radialen Temperaturprofile bei $x = 15$ mm (a), $x = 50$ mm (b) und $x = 100$ mm (c) zwischen verschiedenen Simulationen des „Mascotte A-60“ Testfalls und experimentellen Messwerten entnommen aus Coclite et al. (2015) [33] bzw. Habiballah et al. (2006) [68].	136
5.22	Konturen der Dichte, der Temperatur, sowie der H ₂ - und O ₂ -Massenbrüche (von oben nach unten) für eine $q-\omega$ Simulation des „DLR-1C“ Testfalls.	140

-
- 5.23 Vergleich der berechneten und gemessenen mittleren LOX-Strahllängen (normiert mit d_{LOX}) (a) sowie der mittleren Brennkammerdrücke (b) bei variierendem O/F-Verhältnis für die drei Testfälle „DLR-1A“, „DLR-1B“ und „DLR-1C“. 141
- 5.24 Vergleich der berechneten und gemessenen normierten Wandtemperaturen bei variierendem O/F-Verhältnis für die drei Testfälle „DLR-1C“ (a), „DLR-1B“ (b) und „DLR-1A“ (c). Experimentelle Daten wurden im Rahmen des DLR-Projekts ProTau von Suslov et al. (2015, 2016) [210, 211] zur Verfügung gestellt. 143
- 5.25 Vergleich berechneter und gemessener spektraler Leistungsdichten der Druckfluktuationen für die beiden Testfälle „DLR-2“ (a) und „DLR-3“ (b). 144

Tabellenverzeichnis

2.1	Konstanten im TRAPP Modell von Huber und Hanley (1996) [82] (aus Poling et al. (2001) [176]).	66
5.1	Übersicht über die simulierten Testfälle.	102
5.2	Geometrische und operative Details für den „N ₂ -Strahl“ Testfall.	105
5.3	Einstellungen der 2D-Referenzsimulation für den „N ₂ -Strahl“ Testfall.	107
5.4	Einstellungen der DDES Simulationen und der k - ω SST RANS Vergleichs- simulation für den „N ₂ -Strahl“ Testfall.	112
5.5	Geometrische und operative Details für den „CO ₂ -Rohr“ Testfall.	118
5.6	Eigenschaften der untersuchten Gitter für den „CO ₂ -Rohr“ Testfall.	123
5.7	Einstellungen der Referenzsimulation für den „CO ₂ -Rohr“ Testfall.	123
5.8	Geometrische und operative Details für den „Mascotte A-60“ Testfall.	129
5.9	Einstellungen der Referenzsimulation für den „Mascotte A-60“ Testfall.	131
5.10	Geometrische und operative Details für die „DLR“ Testfälle.	139
5.11	Einstellungen für die „DLR“ Testfälle.	140
D.1	Speziesparameter für die verwendeten Fluide.	179
D.2	Gefittete NASA-Polynome in 7-Koeffizienten Form.	180
D.3	Gefittete Polynome für Idealgas-Viskositäten.	181
D.4	Gefittete Polynome für Idealgas-Wärmeleitfähigkeiten.	181

Kurzfassung

Um die komplexen Phänomene turbulenter Durchmischung und Verbrennung in Raketenbrennkammern besser zu verstehen und den Auslegungsprozess in Zukunft verstärkt zu unterstützen, gewinnt der Einsatz numerischer Strömungssimulationen (CFD) dank der zunehmend verfügbaren Rechenressourcen seit Jahren an Bedeutung. Da der Trend für zukünftige Raketentriebwerke hin zu höheren Leistungsdichten und damit höheren Brennkammerdrücken geht, geraten Brennkammern mit über- und transkritischer Einspritzung, bei denen der Brennkammerdruck die kritischen Drücke der Treibstoffe überschreitet, auch in der Simulation zunehmend in den Fokus wissenschaftlicher Untersuchungen mittels CFD. Das dabei auftretende, stark nichtlineare thermodynamische Verhalten mit den damit verbundenen großen räumlichen Gradienten stellt in CFD-Simulationen eine erhebliche Herausforderung hinsichtlich der Genauigkeit und Stabilität dar.

Ziel dieser Arbeit ist die Implementierung eines konsistenten Thermodynamikmoduls in den vorhandenen CFD-Code TASC3D zur Simulation von Raketenbrennkammern mit transkritischer Einspritzung. Dies erfordert zahlreiche Modifikationen im Code. Die ideale Gasgleichung wird durch eine Zustandsgleichung für reale Fluide ersetzt. In dieser Arbeit wird hierzu die Soave-Redlich-Kwong Zustandsgleichung verwendet. Wahlweise kann zusätzlich eine Volumenverschiebung zur Verbesserung der vorhergesagten Dichte eingesetzt werden. Dies ermöglicht eine ausreichend hohe Genauigkeit für relevante Anwendungsfälle bei gleichzeitig geringen Rechenkosten. Die Bestimmung aller thermodynamischer Größen basiert auf der reduzierten Helmholtz-Residuumsfunktion. Aus dieser werden auf Grundlage von fundamentalen Gleichungen der Thermodynamik, welche für alle Fluide und Zustandsgleichungen gelten, alle weiteren Größen mittels partieller Ableitungen ermittelt. Für die Berechnung der molekularen Stoffwerte werden zahlreiche Modelle für dichte Fluide aus der Literatur implementiert, validiert und miteinander verglichen. Weitere Modifikationen betreffen das zeitliche Diskretisierungsschema mit einer Prädiktion für die effiziente Simulation bei niedrigen Machzahlen im Limit inkompressibler Strömungen sowie das räumliche Diskretisierungsschema. Ein mehrdimensionales, hochgenaues Limitierungsverfahren namens MLP^{ld} verhindert die Ausbildung von Instabilitäten in Bereichen extrem hoher räumlicher Gradienten der Dichte und ermöglicht eine Diskretisierung der reibungsfreien Flüsse bis fünfter Ordnung im Raum.

Die Validierung des implementierten Realgasmoduls erfolgt durch Simulationen zweier inerte Strömungen und zweier Strömungen mit Verbrennung bei jeweils überkritischen Drücken. Der turbulente Strahlzerfall und Wärmeübergang an der Wand werden in den untersuchten Testfällen ebenso betrachtet wie die Verbrennung von Wasserstoff und Sauerstoff in Modellraketenbrennkammern mit einem zentralen Koaxialinjektor. Dabei kommen überwiegend recheneffiziente und stationäre RANS Simulationen basierend auf Zweigleichungsturbulenzmodellen ($q-\omega$, $k-\omega$ und $k-\omega$ SST) zum Einsatz. Der Einsatz von RANS Simulationen ermöglicht umfangreiche Parameter- und Sensitivitätsstudien. Zur Untersuchung instationärer Phänomene werden jedoch auch URANS Simulationen und ein hybrides URANS / LES Verfahren namens DDES (Delayed Detached-Eddy Simulation) verwendet. Die Ergebnisse der Simulationen werden mit aus der Literatur verfügbaren, experimentellen Daten verglichen. Zudem werden die Möglichkeiten und Grenzen der verschiedenen Turbulenzmodelle herausgearbeitet.

Abstract

The process of turbulent mixing and combustion in rocket combustion chambers involves complex phenomena, which have by far not been fully understood. For a better understanding and to improve model predictability in the design process of rocket engines, computational fluid dynamics (CFD) simulations gain ongoing importance due to increasing computing resources. The trend for future rocket engines is towards higher power densities and thus higher pressures. Hence, rocket combustors with transcritical and supercritical injection, i. e. engines with operating chamber pressures above the critical pressure of the propellants, are in increasing focus of numerical studies by CFD. The high nonlinearity of the thermodynamic behavior at these conditions and the associated strong spatial gradients are a great challenge for CFD codes with respect to accuracy and stability.

The goal of this work is the implementation of a consistent real gas thermodynamic framework into the existing CFD code TASC3D to simulate turbulent reactive flows in rocket combustors with transcritical injection. This requires several modifications of the code. The ideal gas law is no longer valid and must be replaced by a real gas equation of state. The Soave-Redlich-Kwong equation is used in this thesis. Optionally, a volume translation method can be applied to improve the prediction of densities. An accurate representation of the thermodynamic behavior at low additional computational cost is achieved in this way for the thermodynamic range of interest. The determination of all thermodynamic quantities relies on the reduced residual Helmholtz energy. Based on fundamental thermodynamic relations valid for all fluids and equations of state, all other thermodynamic variables are derived from it via partial derivatives. For the calculation of molecular transport properties, various models from literature valid for dense fluids are implemented, validated, and compared to each other. Further adaptations are necessary concerning the time integration scheme, which is based on a preconditioning technique to improve convergence at low Mach numbers in the limit of incompressible flow. Moreover, the employed spatial discretization scheme has to be modified. A high-order multidimensional limiting scheme termed MLP^{ld} is used in this work. It prevents the formation of instabilities in regions of excessively large spatial gradients and enables a discretization of inviscid fluxes up to fifth order in space.

Validation of the implemented real gas framework is accomplished by the simulation of two nonreacting and two reacting flows at conditions with supercritical pressures with respect to the injected fluids. The disintegration of a turbulent, round jet and the prediction of wall

heat loads as well as the combustion of hydrogen and oxygen in two model rocket combustors with a single element shear coaxial injector are in focus of the investigated test cases. Cost and time efficient steady-state RANS simulations based on two-equation turbulence models ($q-\omega$, $k-\omega$, and $k-\omega$ SST) are mainly employed in this work. These allow comprehensive parameter and sensitivity studies. To investigate unsteady phenomena, URANS simulations and a hybrid URANS / LES technique named DDES (delayed detached-eddy simulation) are utilized. Numerical results are compared to experimental data from literature. The potentials and limits of the employed turbulence modeling strategies for the investigated applications with supercritical flow are outlined.

1 Einleitung

1.1 Einführung

Der spezifische Impuls I_{sp} ist ein Maß für die Effizienz von Raketentriebwerken und das Verhältnis von gewonnenem Impuls zur eingesetzten Treibstoffmenge. Für eine an den Umgebungsdruck angepasste Düse (Druck am Düsenaustritt entspricht dem Umgebungsdruck p_a) berechnet sich der I_{sp} unter Annahme eines perfekten Gases (konstanter Adiabatenexponent γ) zu (Messerschmid und Fasoulas (2011) [142])

$$I_{\text{sp}} = \frac{1}{g} \sqrt{\frac{2\gamma}{\gamma-1} \cdot \frac{R_u T_c}{M_w} \cdot \left[1 - \left(\frac{p_a}{p_c} \right)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}} \right]}. \quad (1.1.1)$$

Dabei ist $g = 9,81 \text{ m/s}^2$ die Erdbeschleunigung, $R_u = 8,31452 \text{ J/(mol} \cdot \text{K)}$ die universelle Gas-konstante, M_w das mittlere Molekulargewicht der austretenden Gase und T_c die gemittelte Verbrennungstemperatur in der Brennkammer. Aus Glg. (1.1.1) ist ersichtlich, dass die Effizienz eines Triebwerks von der Treibstoffkombination sowie dem Brennkammerdruck p_c abhängt.

Die meisten Haupt- und Oberstufentriebwerke von Raketen (z. B. Vulcain II¹, SSME², Vinci³) werden heutzutage mit Wasserstoff (H_2) als Brennstoff und LOX, also kryogenem Sauerstoff (O_2), als Oxidator betrieben. Diese werden häufig durch Koaxialinjektoren in die Brennkammer eingebracht. Die Treibstoffkombination H_2 - O_2 ist sehr energiereich und ergibt dank des sehr niedrigen Molekulargewichts von H_2 sowie der hohen Verbrennungstemperatur bis ca. 4000 K (bei stöchiometrischer Mischung) einen hohen spezifischen Impuls von ca. 400 s im Vakuum (Messerschmid und Fasoulas (2011) [142]).

Um die Leistung und Effizienz von Raketenantrieben in Bodennähe ($p_a \approx 1 \text{ bar}$) zu steigern, geht der Trend in der Entwicklung neuer Triebwerke hin zu höheren Brennkammerdrücken. Abbildung 1.1 zeigt für den Bodenbetrieb den Term $1 - (p_a/p_c)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}}$ aus Glg. (1.1.1) als Maß für die Effizienz eines Raketentriebwerks in Abhängigkeit des Brennkammerdrucks p_c für verschiedene Adiabatenexponenten. Mit zunehmendem Druck verbessert sich die Effizienz, auch

¹ Hauptstufentriebwerk der Ariane 5.

² Triebwerk des ausgerangierten Space Shuttles.

³ Geplantes Oberstufentriebwerk für Ariane 6.

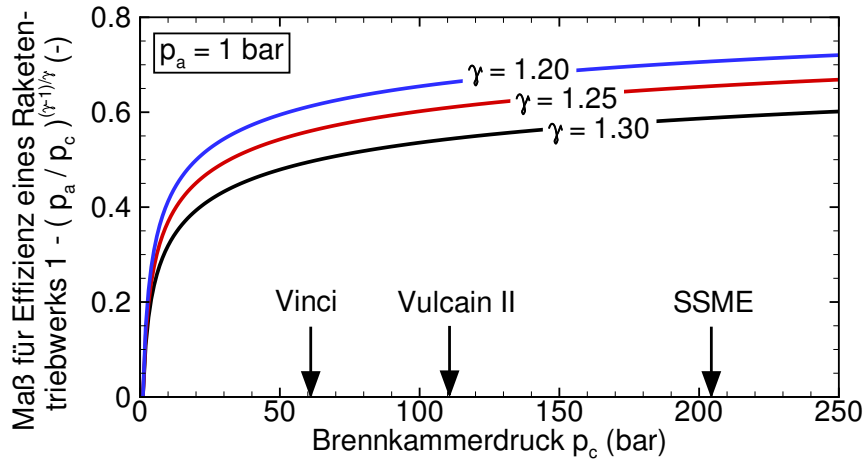


Abbildung 1.1: Zunahme von $1 - (p_a/p_c)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}}$ als Maß für die Effizienz eines Raketentriebwerks in Abhängigkeit vom Brennkammerdruck p_c für verschiedene Adiabatenexponenten.

wenn zu höheren Drücken eine gewisse Sättigung in der Effizienzsteigerung eintritt. Als weiterer, positiver Effekt, welcher nicht in Abb. 1.1 erfasst wird, verschiebt sich das chemische Gleichgewicht bei höheren Drücken. Die Dissoziation von stabilen Spezies in Radikale wird verringert und die Rekombination entsprechend erhöht (Peters (2010) [168]). Die sonst in den Radikalen gebundene chemische Energie steht somit in erhöhtem Maße als thermische Energie (höheres T_c) zur Verfügung und kann umgewandelt als kinetische Energie am Düsenaustritt zur Beschleunigung der Rakete genutzt werden. Als Nachteil der erhöhten Brennkammerdrücke steigt auch die Energiedichte und damit die Wärmebelastung der Brennkammerwände. Diese müssen entsprechend gekühlt und deren Wärmebelastung zuverlässig vorhergesagt werden.

Sehr hohe Drücke stellen auch eine Herausforderung für die numerische Strömungssimulation (CFD, engl.: computational fluid dynamics) dar. Das phänomenologische Verhalten von Strömungen ohne und mit Verbrennung bei Drücken oberhalb des thermodynamisch kritischen Drucks p_{cr} kann sich, abhängig von den vorherrschenden Temperaturen bezüglich der kritischen Temperatur T_{cr} , wesentlich vom Verhalten bei niedrigen Drücken unterscheiden und spezielle numerische Verfahren erfordern. Als Beispiele für die großen Unterschiede zwischen unterkritischer ($p_c < p_{cr}$) und transkritischer ($p_c > p_{cr}$) Einspritzung (jeweils mit unterkritischer Einspritztemperatur am Injektorende $T_{inj} < T_{cr}$) werden hier der turbulente Strahlzerfall eines kryogen eingespritzten Stickstoff-(N₂-)Strahls in eine warme Helium-(He-)Umgebung (nichtreagierende Strömung) bzw. eines LOX-Strahls in eine Modellraketenbrennkammer mit einem zentralen Koaxialinjektor (reagierende H₂-O₂ Strömung) herangezogen. Experimentelle Schattengraphbilder von Mayer et al. (1998) [134] und Mayer et al. (1996) [132] sind hierzu in Abbildungen 1.2 und 1.3 gegeben⁴.

⁴ Eine ausführliche Zusammenstellung dieser und weiterer experimenteller Untersuchungen zu transkritischer Einspritzung mit Verbrennung findet sich in Cutrone (2009) [35].



Abbildung 1.2: Schattengraphbilder eines turbulenten, kryogenen N_2 -Strahls in einer He -Umgebung bei Raumtemperatur mit unterkritischer (10 bar) (a) und transkritischer (60 bar) (b) Einspritzung (Mayer et al. (1998) [134]).

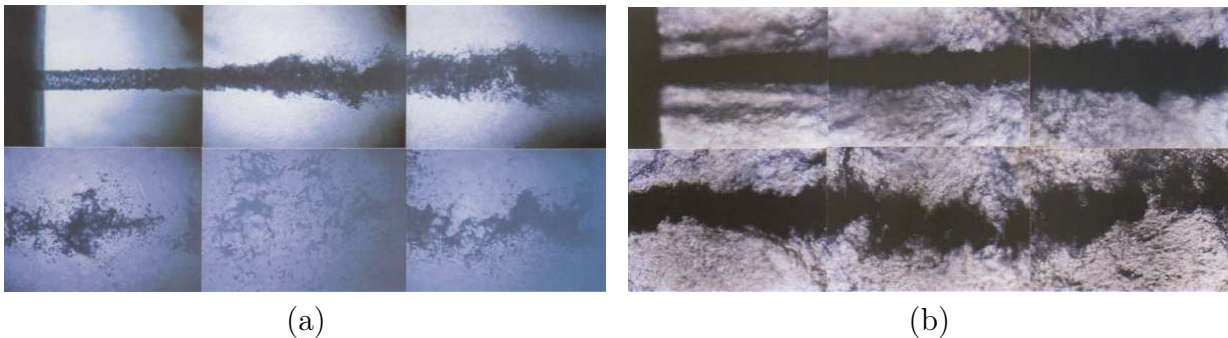


Abbildung 1.3: Schattengraphbilder einer H_2 - O_2 Verbrennung in einer Modellraketenbrennkammer mit einem Koaxialinjektor bei unterkritischer (15 bar) (a) und transkritischer (60 bar) (b) Einspritzung von O_2 (Mayer et al. (1996) [132]).

Erfolgt die Einspritzung bei unterkritischen Drücken, so findet ein klassischer Strahlzerfall statt (Ashgriz (2011) [1]). Scherkräfte an der Phasengrenze zwischen Flüssigkeit und Gasphase führen zum Abscheren von Ligamenten. Diese zerfallen in einem primären Zerstäubungsprozess zu Tropfen und im weiteren Verlauf in einem sekundären Zerfallsprozess zu noch kleineren Tröpfchen, welche schließlich verdunsten und in Strömungen mit Reaktionen in der Gasphase verbrennen. Während bei unterkritischer Einspritzung eine klare Trennung der Flüssig- und Gasphase erkennbar ist, ist bei transkritischer Einspritzung ein kontinuierlicher Übergang zwischen einem sehr dichten, flüssig-ähnlichem Strahl und einer dünnen, gas-ähnlichen Umgebung zu beobachten. Aus thermodynamischer Sicht verschwindet die Oberflächenspannung, so dass keine Phasengrenze mehr existiert. Gleichfalls verschwindet die Verdampfungsenthalpie und es erfolgt eine graduelle Temperaturerhöhung des kalten Strahls. Anstatt eines klassischen Strahlzerfalls findet ein gasförmiger Durchmischungsprozess zwischen Strahl und Umgebung statt, der stark turbulenz- und diffusionsdominiert ist.

Um das komplexe thermodynamische Verhalten von Fluiden und die soeben beschriebenen Strömungsphänomene bei hohen Drücken und transkritischer Einspritzung korrekt abzubilden und simulieren zu können, reichen Modelle für ideale Gase nicht mehr aus. Die ideale Gasgleichung muss durch eine sogenannte Realgasgleichung ersetzt werden, welche die Beziehung zwischen Druck, Temperatur und Dichte über den gesamten thermodynamisch relevanten Bereich hinreichend genau beschreibt. Weiterhin müssen die Stoffgrößen wie Viskosität,

Wärmeleitfähigkeit und binäre Diffusionskoeffizienten mit Hilfe entsprechender, für den Hochdruckbereich validierter Modelle berechnet werden. Um ein robustes numerisches Verfahren zu erhalten, ist es essenziell, all dies in einen thermodynamisch konsistenten Rahmen in den CFD-Code einzubauen.

In der Literatur finden sich seit ca. dem Jahr 2000 zunehmend Veröffentlichungen, welche sich für überkritische Drücke mit der turbulenten Durchmischung und dem turbulenten Strahlzerfall bei kryogener Einspritzung ohne und mit Verbrennung befassen. Bedingt durch die stetig steigenden Rechenkapazitäten kommen dabei nicht nur RANS (Reynolds-gemittelte Navier-Stokes) Simulationen zum Einsatz, sondern zunehmend auch LES (Large-Eddy Simulationen) und DNS (Direkte Numerische Simulationen). Eine Übersicht bis zum Jahre 2009 findet sich hierzu auch in Cutrone (2009) [35].

Miller et al. (2001) [147], Okong'o und Bellan (2003) [163] sowie Bellan (2006) [10] untersuchten das zeitliche Mischungsverhalten in nichtreagierenden n-Heptan- N_2 und H_2 - O_2 Mischungsschichten entgegengesetzter Strömungen mittels hochauflösender DNS. LES wurden für Untersuchungen zum turbulenten Strahlzerfall nichtreagierender Strömungen (Schmitt et al. (2010) [190], Park (2012) [165], Hickey und Ihme (2013) [78], Petit et al. (2013) [169], Müller et al. (2016) [152]), zur Mehrkomponentendiffusion (Soret- und Dufour-Effekt) in der Flammenzone (Oefelein (2006) [161]) und zur Flammendynamik bei der Einspritzung mittels Koaxialinjektoren (Meng und Yang (2003) [139], Yang (2004) [248], Zong und Yang (2006) [250], Masquelet (2013) [130]) eingesetzt. Mittels RANS Simulationen wurde ebenso der turbulente Strahlzerfall nichtreagierender Strömungen analysiert (Branam et al. (2001) [17], Farmer et al. (2001) [47], Blouquin und Lequette (2001) [14], Banuti und Hanne mann (2010) [6], Kim et al. (2011) [95], Park (2012) [165]), aber auch die H_2 - O_2 Verbrennung in Modellraketenbrennkammern mit einem zentralen Koaxialinjektor (Depoutre et al. (2001) [42], Görgen und Knab (2001) [63], Legrand et al. (2001) [112], Cheng und Farmer (2006) [26], Benarous und Liazid (2009) [11], Cutrone (2009) [35], Ruiz (2012) [187], Pohl et al. (2013) [174], Jarczyk (2013) [88], Poschner und Pfitzner (2009, 2010) [179, 178], Coclite et al. (2015) [33], Benmansour et al. (2016) [12] und Banuti et al. (2016) [7]). Die verwendeten numerischen Verfahren unterscheiden sich jedoch nicht nur hinsichtlich der Turbulenzmodellierung (RANS, LES, DNS), sondern z. B. auch hinsichtlich der verwendeten Verbrennungsmodelle (Finite-Raten Chemie, Flamelet, Chemisches Gleichgewicht) und Zustandsgleichungen (Soave-Redlich-Kwong, Peng-Robinson, modifizierte Benedict-Webb-Rubin Zustandsgleichungen). In dieser Arbeit kommen vorwiegend RANS Simulationen, das Finite-Raten Chemie Modell sowie die Soave-Redlich-Kwong Zustandsgleichung zur Anwendung. Der Einsatz recheneffizienter RANS Simulationen ermöglicht ausführliche Parameterstudien und Einflussanalysen zu einer Vielzahl von Modellen und Parametern. Für Untersuchungen instationärer Phänomene wurden zudem instationäre RANS (URANS) und hybride URANS / LES Rechnungen⁵ (DDES) durchgeführt.

⁵ In der Literatur wird oft vereinfacht von hybriden RANS / LES Verfahren gesprochen.

1.2 Ziel der Arbeit und Übersicht

Ziel der vorliegenden Arbeit ist eine ausführliche Untersuchung von Strömungen bei überkritischen Drücken, speziell mit transkritischer Einspritzung und Verbrennung in Raketenbrennkammern. Dafür wurde ein konsistentes thermodynamisches Modell in den CFD-Code TASCOM3D implementiert, welcher in der Vergangenheit erfolgreich zur Simulation nicht-reagierender und reagierender Strömungen im Unter- und Überschallbereich eingesetzt wurde (z. B. Gerlinger et al. (2001) [60], Gerlinger (2003) [57], Gerlinger et al. (2010) [61], Gerlinger (2012) [59]). Die Implementierung ist modular, effizient und zudem allgemeingültig für beliebige Spezies und Mischungen sowie Zustandsgleichungen. Die Anwendung des Realgasmoduls ist nicht auf Raketenbrennkammern beschränkt, sondern kann z. B. auch zur Simulation von verfahrenstechnischen Problemstellungen, Pipelineströmungen, der Kühlung überkritischer Wasserstoffreaktoren (SCWR, engl.: supercritical water-cooled reactor) etc. eingesetzt werden.

Der Aufbau der nachfolgenden Kapitel gliedert sich wie folgt: Kapitel 2 gibt eine Übersicht über die thermodynamischen Grundlagen und Modelle (inklusive deren Validierung), welche in dieser Arbeit zum Tragen kommen. Anschließend werden in Kapitel 3 die Grundgleichungen zur Simulation turbulenter, reaktiver Strömungen präsentiert, welche im verwendeten CFD-Code TASCOM3D implementiert sind. Das numerische Verfahren zur Lösung dieser Gleichungen wird in Kapitel 4 erläutert. Insbesondere wird auf die eingesetzte Präkonditionierungstechnik eingegangen, welche essenziell ist zur Simulation von Strömungen bei (lokal) niedrigen Machzahlen. Schließlich erfolgt in Kapitel 5 eine Validierung des implementierten Realgasmoduls anhand mehrerer Testfälle ohne und mit Verbrennung, bevor eine Zusammenfassung der Ergebnisse und Anregungen für weitere Untersuchungen gegeben werden.

2 Thermodynamische Grundlagen

Das thermodynamische Verhalten von Fluiden kann mathematisch mit Hilfe sogenannter Zustandsgleichungen (ZGL, engl.: equation of state) in Kombination mit fundamentalen, thermodynamischen Beziehungen beschrieben werden. Letztere gelten universell für alle Zustandsgleichungen und Spezies bzw. Mischungen. Dieses Kapitel vermittelt das benötigte thermodynamische und mathematische Hintergrundwissen zur Beschreibung des Verhaltens von (dichten) Fluiden unter Realgasbedingungen, hier auch „reale Fluide“ genannt. Deren Zustand kennzeichnet sich dadurch, dass die für dünne Gase (Gase mit relativ niedriger Dichte) sehr genaue Zustandsgleichung für ideale Gase (iG), auch ideale Gasgleichung oder Idealgas(zustands)gleichung (iG ZGL) genannt, ihre Gültigkeit verliert. Stattdessen müssen Zustandsgleichungen für reale Fluide, für gewöhnlich Realgas(zustands)gleichungen⁶ genannt, verwendet werden.

Zunächst wird in den Abschnitten 2.1 und 2.2 das phänomenologische Verhalten von Reinstoffen und Gemischen unter Realgasbedingungen beleuchtet. Zugleich liefert eine Validierung anhand experimenteller Daten eine Einschätzung über die Genauigkeit der in dieser Arbeit verwendeten (modifizierten) Realgasgleichung von Soave (1972) [202], welche im darauffolgenden Abschnitt 2.3 ausführlich behandelt wird. Diese stellt eine Erweiterung der Zustandsgleichung von Redlich und Kwong (1949) [182] dar und wird deshalb geläufig auch Soave-Redlich-Kwong (SRK) Zustandsgleichung genannt. Anschließend werden in Abschnitt 2.4 die mathematischen und thermodynamischen Grundlagen erklärt, welche zur Beschreibung des Verhaltens idealer und realer Fluide notwendig sind. Für letztere werden die Konzepte von thermodynamischen Potentialen, Residuumsfunktionen und partiellen Größen eingeführt, welche in Verbindung mit einer Zustandsgleichung und den Fluideigenschaften idealer Gase die Berechnung aller weiterer thermodynamischer Größen wie Schallgeschwindigkeit, Wärmekapazitäten usw. ermöglichen. Als letzten Punkt dieses Kapitels wird in Abschnitt 2.5 auf die Modellierung der Stoffwerte Viskosität, Wärmeleitfähigkeit und Diffusionskoeffizienten unter Realgasbedingungen eingegangen.

⁶ Eine treffendere Bezeichnung wäre Realfluid(zustands)gleichungen, da mit diesen oft nicht nur Gase, sondern auch Flüssigkeiten und Mehrphasengemische beschrieben werden können.

2.1 Verhalten und Vorhersage realer Reinstoffe

Das thermodynamische Verhalten von dünnen Gasen (und auch Gasgemischen), also bei „relativ“ hohen Temperaturen und niedrigen Drücken, kann sehr genau durch die Zustandsgleichung für ideale Gase

$$pV = nR_u T \quad (2.1.1)$$

beschrieben werden. Dabei ist p der thermodynamische Druck, V das Volumen, n die darin enthaltene Stoffmenge, T die Temperatur und R_u die bereits eingeführte universelle Gaskonstante. „Relativ“ bezieht sich auf die jeweiligen Größen am kritischen Punkt des Fluids, also die kritische Temperatur T_{cr} und den kritischen Druck p_{cr} . Diese variieren sehr stark von Fluid zu Fluid und sind für die in dieser Arbeit verwendeten Spezies in Tab. D.1 im Anhang gegeben. Ein Wert von 50 bar bedeutet z. B. für Wasserstoff (H_2) einen überkritischen Zustand ($p > p_{cr,H_2} \approx 13$ bar), für Sauerstoff (O_2) einen nahe kritischen Zustand ($p \approx p_{cr,O_2} \approx 50$ bar) und für Wasser (H_2O) einen unterkritischen Zustand ($p < p_{cr,H_2O} \approx 221$ bar) bezüglich des Drucks. Signifikante Abweichungen vom idealen Gasgesetz ergeben sich bei hohen Dichten. Das Eigenvolumen der Moleküle sowie intermolekulare Anziehungskräfte, welche beide im Idealgasmodell vernachlässigt werden, spielen dann eine entscheidende Rolle (Poling et al. (2001) [176]).

Abbildung 2.1(a) zeigt mit der SRK Zustandsgleichung berechnete Isothermen (durchgezogene Linien) für O_2 in einem p - v_m -Diagramm (mit dem molaren⁷ Volumen $v_m = V/n$). Der kritische Punkt eines Reinstoffes ist als dasjenige Wertetripel (T, p, v_m) definiert, bei dem die sogenannte kritische Isotherme mit $T = T_{cr}$ einen Sattelpunkt besitzt. Der Bereich mit $p > p_{cr}$ wird meist als überkritisch bezeichnet, wobei in der Literatur manchmal noch für $p > p_{cr}$ und $T < T_{cr}$ die Bezeichnung transkritisch verwendet wird (Ma et al. (2014) [127], Zong und Yang (2006) [250]). Eine klare Abgrenzung der Bereiche gasförmig, überkritisch, transkritisch und flüssig ist jedoch nicht möglich, da diese in dieser Reihenfolge kontinuierlich ineinander übergehen.

Für Temperaturen und/oder Drücke oberhalb des kritischen Punktes findet kein Phasenübergang bei Variation der jeweils anderen Größe statt. Für Temperaturen und Drücke unterhalb des kritischen Punktes ergibt sich jedoch beim Phasenübergang von flüssig zu gasförmig bei konstantem Druck und konstanter Temperatur ein diskontinuierlicher Sprung in der Dichte bzw. dem (molaren) Volumen. Das zwischen Gas- und Flüssigphase liegende Zweiphasengebiet wird durch die Sättigungslinie (Dampfdruckkurve) bestehend aus Siede- und Taulinie abgegrenzt. Für Fluide im thermodynamischen Gleichgewicht ist der Zustand in diesem Gebiet instabil und sie zerfallen spontan in eine Flüssigphase und eine Gasphase. Bei langsamem, homogenem Abkühlen bzw. Aufheizen ist auch eine gewisse Übersättigung des Dampfes (unterkühlter Dampf) bzw. der Flüssigkeit (überhitzte Flüssigkeit) beobachtbar.

⁷ Der Index m kennzeichnet in dieser Arbeit stets auf die Stoffmenge bezogene molare Größen.

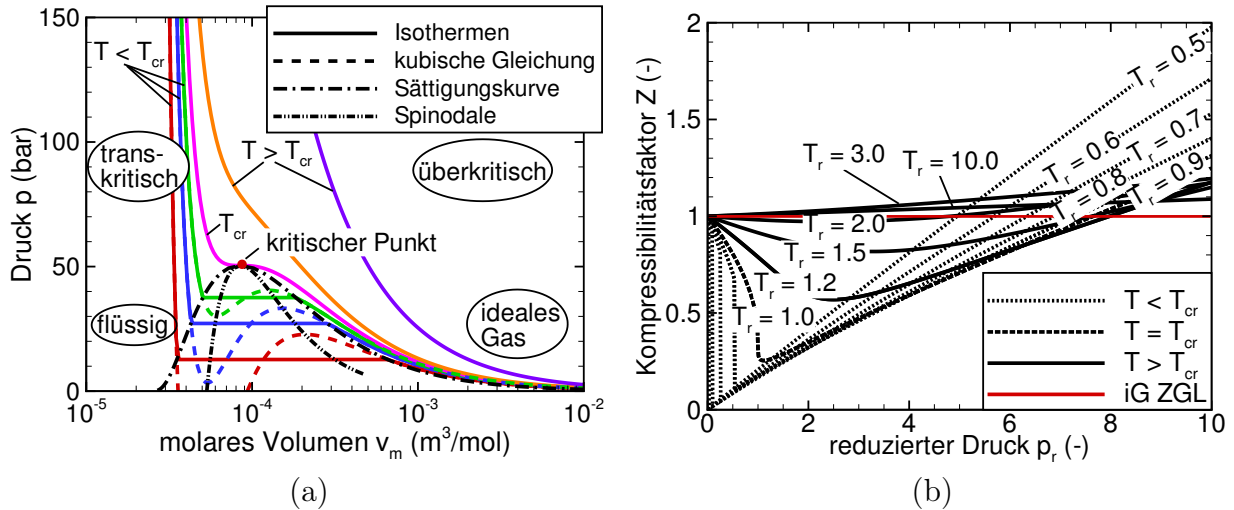


Abbildung 2.1: p - v_m -Diagramm (a) und Kompressibilitätsdiagramm (b) von O_2 berechnet mit der SRK Zustandsgleichung.

Fluideigenschaften in diesem sogenannten metastabilen Zustand ändern sich dann entlang der gestrichelten Kurven bis ein spontaner Zerfall in zwei Phasen eintritt (O'Connell und Haile (2005) [159]). Innerhalb der sogenannten Spinodalen, welche durch die Extrema der metastabilen Kurven beschrieben wird, herrscht ein Gebiet absoluter mechanischer Instabilität (O'Connell und Haile (2005) [159]), welches nicht erreicht werden kann. Metastabile Zustände können durch die Theorie der Nichtgleichgewichtsthermodynamik (Keizer (1987) [92]) beschrieben werden, welche in dieser Arbeit jedoch keine Anwendung findet. Jarczyk (2013) [88] untersuchte theoretisch den Einfluss von thermodynamischen Nichtgleichgewichtseffekten in Raketenbrennkammern mit H_2 - O_2 Verbrennung und kam zu dem Ergebnis, dass diese vernachlässigt werden können.

Das Verhalten realer Fluide (und Gemische) weicht bei hohen Dichten stark von der Idealgasgleichung ab⁸, was sich durch den Kompressibilitätsfaktor

$$Z = \frac{pV}{nR_u T} = \frac{pv_m}{R_u T} = \frac{pv}{RT} = \frac{p}{\rho_m R_u T} = \frac{p}{\rho RT} \stackrel{iG}{=} 1 \quad (2.1.2)$$

ausdrücken lässt. Dabei gilt die (auch für Gemische) allgemeingültige Beziehung zwischen der (massenbezogenen) Dichte ρ , der molaren bzw. molbezogenen Dichte ρ_m , dem massenspezifischen Volumen v und dem molaren bzw. molspezifischen Volumen v_m

$$\rho = \frac{1}{v} = \frac{M_w}{v_m} = \rho_m M_w \quad (2.1.3)$$

mit dem Molekulargewicht M_w der Spezies (bzw. Mischung). $R = R_u / M_w$ ist die spezifische Gaskonstante. Für ein ideales Gas (Glg. (2.1.1)) ist der Kompressibilitätsfaktor definitions-

⁸ In Strömungen unter Realgasbedingungen können sogar völlig ungewohnte Effekte wie Verdünnungsschläge auftreten (Ferguson et al. (2001) [49], Guardone et al. (2010) [65]).

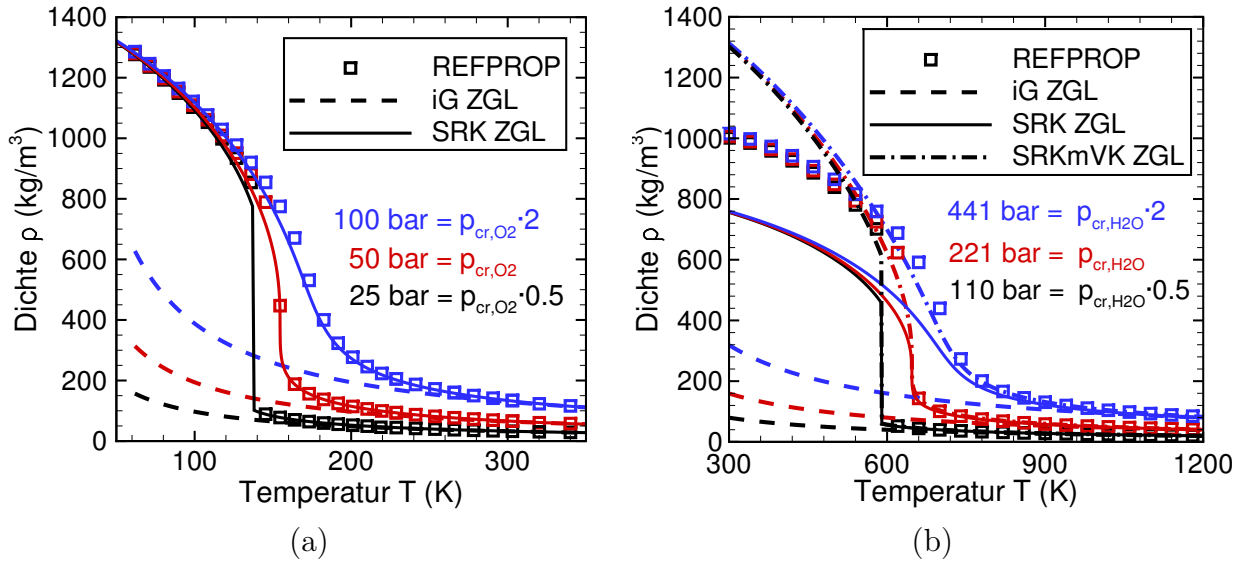


Abbildung 2.2: ρ - T -Diagramm von O₂ (a) und H₂O (b): Vergleich der SRK Zustandsgleichung (für H₂O auch mit konstanter Volumenkorrektur $c = +1,0 \cdot 10^{-5}$ m³/mol) mit der iG Zustandsgleichung und REFPROP-Korrelationen.

gemäß gleich eins⁹.

Abbildung 2.1(b) zeigt das mit der SRK Zustandsgleichung berechnete Kompressibilitätsdiagramm von O₂ ($T_{cr} \approx 155$ K, $p_{cr} \approx 50$ bar). Dabei wird der Kompressibilitätsfaktor über den reduzierten Druck $p_r = p/p_{cr}$ für verschiedene Isothermen bei reduzierten Temperaturen $T_r = T/T_{cr}$ aufgetragen. Das Prinzip der korrespondierenden Zustände (engl.: corresponding states principle) besagt, dass für alle Fluide die so aufgetragenen Linien zusammenfallen (Guggenheim (1945) [67], Leland und Chapplear (1968) [113]). In der Realität ist dies für monoatome und kleinere, unpolare Fluide in guter Näherung zutreffend (Moran und Shapiro (2006) [149]). Für größere und polare Fluide (z. B. langkettige Kohlenwasserstoffe und H₂O) ergeben sich jedoch größere Abweichungen (Leeuwen (1994) [227]). Aus Abb. 2.1(b) ist leicht ersichtlich, dass das ideale Gasgesetz nur für einen sehr eingeschränkten T - p -Bereich¹⁰ eine hinreichend genaue Beschreibung der T - p - ρ -Beziehung liefert. Bei sehr hohen Temperaturen, wie sie in Bereichen von Raketenbrennkammern auftreten, nimmt der Einfluss intermolekularer Anziehungskräfte zwar stark ab. Aufgrund der relativ hohen Dichten spielt jedoch das Eigenvolumen der Moleküle eine zunehmende Rolle, so dass sich selbst hier merkbare Abweichungen vom Idealgasverhalten ergeben können.

Um die Vorhersagegenauigkeit der verwendeten SRK Zustandsgleichung für Raketenbrennkammersimulationen mit H₂-O₂ Verbrennung beurteilen zu können, wurden u. a. berechnete Dichten von O₂, H₂ und H₂O mit denen des idealen Gasgesetzes sowie mit Korrelationen

⁹ Umgekehrt kann aus $Z = 1$ nicht gefolgert werden, dass ein Idealgaszustand vorliegt!

¹⁰ Faustregel für Idealgasbereich: $T > 2T_{cr}$ und $p < 0,1 p_{cr}$ (Sattelmayer (2007) [188]).

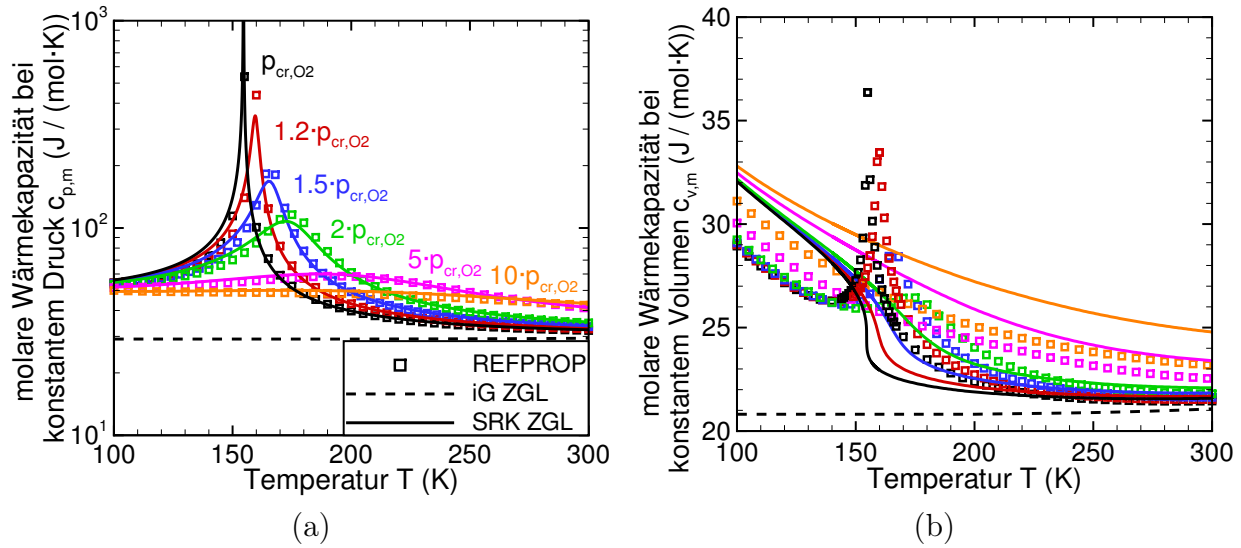


Abbildung 2.3: Molare Wärmekapazitäten bei konstantem Druck (a) bzw. Volumen (b) für O_2 : Vergleich der SRK Zustandsgleichung und iG Zustandsgleichung mit REFPROP-Korrelationen.

aus dem Programm REFPROP¹¹ (Lemmon et al. (2013) [114]) verglichen (siehe Abb. 2.2). Das Hauptaugenmerk liegt bei der Validierung in dieser Arbeit auf einem für Raketentriebwerke mit transkritischer Einspritzung relevanten Druckbereich von ca. 50 - 200 bar (Ley et al. (2011) [117]), wie er typisch ist für heutige und zukünftige Haupt- und auch Oberstufen-triebwerke (z. B. Vulcain II (115 bar), SSME (205 bar), Vinci (61 bar)). Für O_2 entspricht dies einem reduzierten Druckbereich von $p_r \approx 1 - 4$, für H_2O dagegen $p_r \approx 0,25 - 1$.

Bei kryogener Einspritzung von O_2 ($T \lesssim 120$ K) ist aus Abb. 2.2(a) leicht ersichtlich, dass das ideale Gasgesetz keine ausreichende Approximation mehr für die Dichteberechnung darstellt. Die SRK Zustandsgleichung hingegen liefert eine sehr gute Übereinstimmung mit der REFPROP-Korrelation über einen weiten Druck- und Temperaturbereich. Auf der Flüssigkeitsseite sowie bei hohen Drücken und Temperaturen um den kritischen Punkt ergeben sich jedoch Abweichungen in der Dichte von bis zu 15 %.

Für H_2 (hier nicht dargestellt), welches eine sehr niedrige kritische Temperatur von ca. 33 K besitzt, spielen Realgaseinflüsse in Raketenbrennkammern in der Regel nur eine geringe Rolle, da dieser oft zum Kühlen der Brennkammerwände eingesetzt wird und sich dabei auf Temperaturen weit über dessen kritischer Temperatur aufheizt. Bei Verwendung der SRK Zustandsgleichung betragen die Abweichungen zu REFPROP-Korrelationen in der Dichte bei 100 K und Drücken bis 75 bar weniger als 1 %. Bei noch höheren Drücken und/oder sehr niedrigen Einspritztemperaturen von z. B. 60 K können die Unterschiede jedoch durchaus auch um die 15 % liegen.

Für H_2O , welches starke intermolekulare Anziehungskräfte aufgrund seiner Dipoleigenschaft

¹¹ <http://www.nist.gov/srd/nist23.cfm> (28. April 2016). Eine funktionell eingeschränkte Version für ausgewählte Fluide findet sich auch frei verfügbar auf der Homepage von NIST: <http://webbook.nist.gov/chemistry/fluid> (28. April 2016).

besitzt, liefert die SRK Zustandsgleichung bei hohen Dichten nur eine unzureichende Genauigkeit (siehe Abb. 2.2(b)). Die Abweichungen zu REFPROP-Daten betragen auf der Flüssigkeitsseite bis zu 30 %. Mit einer (konstanten) Volumenkorrektur $c = +1,0 \cdot 10^{-5} \text{ m}^3/\text{mol}$ (SRKmVK Zustandsgleichung, siehe Abschnitt 2.3) kann die Genauigkeit (in Teilbereichen) verbessert werden. Solange Kondensation an Brennkammerwänden oder in der Düse keine Rolle spielt und H_2O lediglich gasförmig bei relativ hohen Temperaturen vorkommt, ergibt sich allerdings eine gute quantitative Vorhersage der Dichte mit der SRK Zustandsgleichung. Auch die Idealgaszustandsgleichung ist in diesem Fall ausreichend.

Neben einem stark unterschiedlichen Verhalten in der Dichte ergeben sich für reale Fluide auch für andere thermodynamische Größen wie die Enthalpie, Schallgeschwindigkeit und spezifische Wärmekapazitäten deutliche Unterschiede im Vergleich mit den jeweiligen Größen eines idealen Gases. Abbildung 2.3 vergleicht für O_2 die mit der SRK Zustandsgleichung berechneten (spezifischen) molaren Wärmekapazitäten bei konstantem Druck ($c_{p,m}$) und Volumen ($c_{v,m}$) im überkritischen Bereich mit REFPROP-Korrelationen und denjenigen Werten unter Annahme eines idealen Gases. Der Realgaseinfluss ist evident.

Direkt am kritischen Punkt, an dem die Ableitung $(\partial p / \partial V)|_{T=T_{\text{cr}}}$ zu Null wird (Sattelpunkt!), geht $c_{p,m}$ gegen unendlich¹² (Abb. 2.3(a), siehe auch Glg. (2.4.51) in Abschnitt 2.4.2). Für höhere Drücke flacht dieser Peak allmählich entlang der sogenannten Widom-Linie ab, die entlang derjenigen Punkte zwischen transkritischem und überkritischem Bereich verläuft, welche auf jeder Isotherme das Maximum von $(\partial p / \partial V)|_T$ darstellen (Simeoni et al. (2010) [197]). Die SRK Zustandsgleichung liefert für $c_{p,m}$ qualitativ und quantitativ eine sehr gute Übereinstimmung mit REFPROP-Daten.

Für $c_{v,m}$ ergibt sich in der Realität ebenso ein Peak nahe des kritischen Punktes, auch wenn dieser im Gegensatz zu $c_{p,m}$ am kritischen Punkt nicht gegen unendlich geht (Abb. 2.3(b)). Dieser Effekt kann durch einfache kubische Zustandsgleichungen wie die SRK Zustandsgleichung nicht beschrieben werden, so dass sich hier bei Temperaturen um die kritische Temperatur nicht nur quantitativ, sondern auch qualitativ deutliche Unterschiede zeigen.

2.2 Verhalten und Vorhersage realer Mischungen

Die Zusammenhänge aus Gleichungen (2.1.2) und (2.1.3) gelten auch für Fluidgemische. Lediglich das Molekulargewicht der Mischung muss nun aus den Molekulargewichten der enthaltenen Spezies $M_{w,\alpha}$ berechnet werden. Für eine Mischung aus N_{sp} verschiedenen Komponenten ergibt sich dieses aus

¹² Für Mischungen ist diese Überhöhung endlich.

$$M_w = \sum_{\alpha=1}^{N_{sp}} X_{\alpha} M_{w,\alpha} = \left[\sum_{\alpha=1}^{N_{sp}} \frac{Y_{\alpha}}{M_{w,\alpha}} \right]^{-1}. \quad (2.2.1)$$

Dabei gelten für die Molen- und Massenbrüche X_{α} und Y_{α} sowie die Stoffmenge und Masse n_{α} und m_{α} einer Spezies α in einer Mischung aus n Mol mit der Masse m folgende Zusammenhänge:

$$X_{\alpha} := \frac{n_{\alpha}}{n} \quad \text{mit} \quad \sum_{\alpha=1}^{N_{sp}} n_{\alpha} = n, \quad \sum_{\alpha=1}^{N_{sp}} X_{\alpha} = 1, \quad (2.2.2)$$

$$Y_{\alpha} := \frac{m_{\alpha}}{m} \quad \text{mit} \quad \sum_{\alpha=1}^{N_{sp}} m_{\alpha} = m, \quad \sum_{\alpha=1}^{N_{sp}} Y_{\alpha} = 1, \quad (2.2.3)$$

$$Y_{\alpha} = X_{\alpha} \frac{M_{w,\alpha}}{M_w} \quad \text{und} \quad m = M_w n. \quad (2.2.4)$$

Abgesehen von diesen allgemeingültigen Zusammenhängen unterscheidet sich das Verhalten von Fluidgemischen in einigen Punkten wesentlich vom Verhalten der Reinstoffe. Beispielsweise ist der kritische Punkt nicht mehr Sattelpunkt einer Isothermen. Zudem zeigen sich stark nichtlineare Zusammenhänge in Mischungen. So ergeben sich extensive Größen wie Volumen und Enthalpie nicht mehr als lineares, massen- / molgewichtetes Mittel der jeweiligen Größen der Reinstoffe bei entsprechenden p - T -Bedingungen, wie dies für ideale Gase der Fall ist. Auch die Theorie zur Beschreibung von Mischungen, insbesondere von Zwei- und Mehrphasengemischen, ist wesentlich komplizierter. Da der Schwerpunkt dieser Arbeit auf einphasigen, über- bzw. transkritischen Simulationen liegt, wird dieses Thema hier nur am Rande angeschnitten. Eine ausführliche theoretische Behandlung der Mehrphasenthermodynamik von Gemischen und der Mehrphasenströmungen kann der weiterführenden Literatur entnommen werden (z. B. Baehr (2005) [5], Danesh (2003) [37], Faghri und Zhang (2006) [46], Prosperetti und Tryggvason (2007) [181], Stephan et al. (2010) [206], Whitson und Brulé (2000) [241]).

Die Genauigkeit von Zustandsgleichungen für Gemische wird oft anhand experimentell ermittelter Zweiphasendiagramme binärer Gemische validiert, da hierzu eine große Datenbasis vorhanden ist. Abbildung 2.4(a) zeigt ein typisches p - X -Phasendiagramm für eine Methan-Ethan (CH_4 - C_2H_6) Mischung. Beide Spezies sind relativ klein und unpolar. Weiterhin haben sie recht ähnliche thermodynamische Eigenschaften und können deshalb gut ohne spezielle Anpassungen mit einfachen Zustandsgleichungen und Mischungsregeln (siehe Abschnitt 2.3.2) beschrieben werden. Die mit der SRK Zustandsgleichung berechneten Sättigungskurven (Siede- und Taulinie) zeigen eine sehr gute Übereinstimmung mit experimentellen Messwerten, welche Zhang und Duan (2002) [249] entnommen wurden.

Das zugehörige p - v_m -Diagramm bei einem CH_4 -Molanteil von 30 % zeigt Abb. 2.4(b). Der Übergang zwischen Gas- und Flüssigphase findet nun nicht mehr bei gleichzeitig konstantem

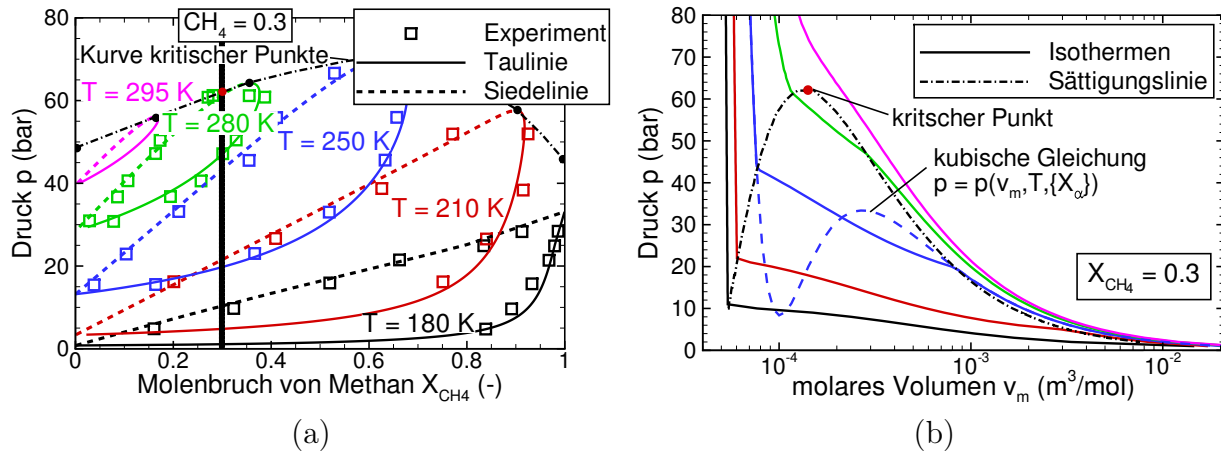


Abbildung 2.4: p - X -Diagramm (a) und p - v_m -Diagramm bei $X_{\text{CH}_4} = 0,3$ (b) für eine CH_4 - C_2H_6 Mischung. Vergleich der SRK Zustandsgleichung mit experimentellen Werten entnommen aus Zhang und Duan (2002) [249].

Druck und konstanter Temperatur statt. Die einzelnen Komponenten der Mischung sieden bzw. kondensieren stattdessen unterschiedlich, nämlich wenn der Partialdruck einer Komponente ihren jeweiligen Sättigungsdruck bei der entsprechenden Temperatur unter- bzw. überschreitet. Ein Durchschreiten des Zweiphasengebietes kann auch noch bei Temperaturen und / oder Drücken oberhalb des kritischen Punktes der Mischung stattfinden. Dieser liegt im Gegensatz zu Reinstoffen nicht mehr im Maximum der Sättigungskurve im p - v_m -Diagramm. Eine Definition und Verwendung des Begriffs „überkritisch“ anhand des kritischen Punktes der Mischung analog zu Reinstoffen erscheint daher problematisch¹³.

Die mit der Zusammensetzung variierenden kritischen Punkte der Mischung sind diejenigen Punkte auf den Sättigungskurven, an denen die Flüssig- und Gasphase hinsichtlich Dichte und Zusammensetzung identisch sind. Im p - X -Diagramm (Abb. 2.4(a)) sind dies die obersten Punkte der Sättigungskurven mit waagrechter Tangente, an denen die Siede- und Taulinien zusammentreffen. Wie leicht ersichtlich ist, wandert der kritische Punkt einer Mischung auf einer nichtlinearen Kurve zwischen den kritischen Punkten der Reinstoffe. Der kritische Druck der Mischung kann dabei Werte annehmen, die ein Vielfaches, gar Größenordnungen über den kritischen Drücken der Reinstoffe liegen. Insbesondere für Mischungen aus stark unterschiedlichen und / oder polaren Fluiden kann sich hier ein sehr stark nichtlineares Verhalten ergeben. Dies ist z. B. in einem H_2 - N_2 System der Fall, welches als p - X -Diagramm in Abb. 2.5 abgebildet ist. Da N_2 ein ähnliches thermodynamisches Verhalten zeigt wie O_2 , kann dieses Diagramm auch für eine qualitative Einschätzung eines H_2 - O_2 Systems und dessen Vorhersagegenauigkeit mit der SRK Zustandsgleichung herangezogen werden¹⁴. Es zeigt sich, dass auch bei sehr hohen Drücken und niedrigen Temperaturen gegebenenfalls mit Mehrphaseneffekten zu rechnen ist. Ein lokales Vorliegen eines unverbrannten H_2 - O_2 Gemisches bei

¹³ Für Mischungen stellen die sogenannte Krikondenbare bzw. Krikondentherme die Maximalwerte von Druck bzw. Temperatur dar, bei denen Zwei- oder Mehrphasigkeit auftreten kann (Danesh (2003) [37]).

¹⁴ Aufgrund der hohen Reaktivität und damit Gefährlichkeit von H_2 - O_2 Gemischen liegen hierzu keine ausreichenden experimentellen Vergleichsdaten vor.

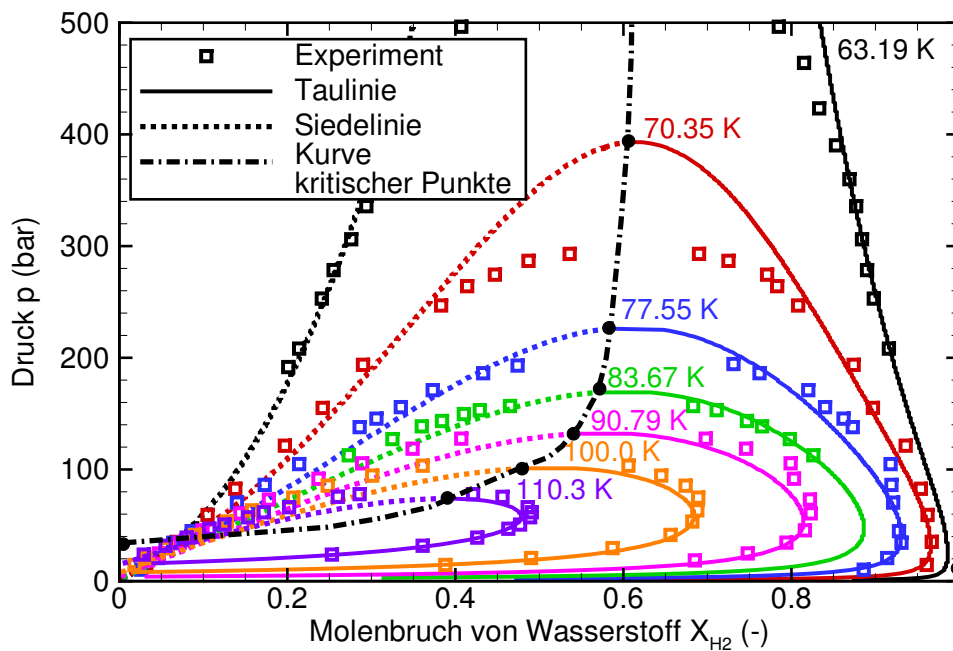


Abbildung 2.5: p - X -Diagramm für eine H_2 - N_2 Mischung: Vergleich der SRK Zustandsgleichung mit experimentellen Werten von Streett und Calado (1978) [209].

so niedrigen Temperaturen wäre in Raketenbrennkammern z. B. bei abgehobener Flamme am Austritt des Injektors möglich. Bei ankernden Flammen ist jedoch davon auszugehen, dass die sehr heiße Reaktionszone, welche unverbranntes O_2 und H_2 trennt, diese sehr schnell aufheizt und somit in der Mischungsschicht in Flammennähe die Annahme einer einphasigen Mischung gerechtfertigt ist.

Zweiphaseneffekte können jedoch auch noch beim Anfahren des Triebwerks vor der Zündung und Ausbildung einer stabilen Flamme eine Rolle spielen. Bei ausgebildeten, stabilen Flammen könnten Zonen lokaler Verlöschung zu Kondensation und sogar Eisbildung führen. Zudem können an gekühlten Wänden oder bei der Expansion in der Schubdüse Gemische aus unverbranntem O_2 bzw. H_2 mit H_2O kondensieren oder gar gefrieren. Gleiches gilt für einströmende Umgebungsluft an gekühlten Düsenwänden, wenn eine abgelöste Strömung in der Düse vorliegt. Kondensation und Eisbildung wurden sowohl in Experimenten als auch in realen Triebwerken festgestellt (Frey et al. (2011) [52], Smith et al. (2002) [200]), werden in den Simulationen dieser Arbeit jedoch nicht berücksichtigt.

Ein Vergleich experimenteller Daten mit berechneten Siede- und Taulinien der SRK Zustandsgleichung in Abb. 2.5 zeigt, dass diese das Mischungsverhalten von H_2 - N_2 Gemischen sowohl qualitativ als auch quantitativ sehr gut wiedergeben kann. Lediglich bei sehr niedrigen Temperaturen (< 77 K) zeigen sich teilweise starke Abweichungen. Die Genauigkeit einer Zustandsgleichung bei der Berechnung eines Phasendiagramms ist jedoch nur bedingt aussagefähig über die Genauigkeit weiterer Größen wie Volumen und Enthalpie der Mischung. Das berechnete Verhalten beider molarer Größen bei hohen Drücken zusammen mit einem Vergleich zu experimentellen Messdaten ist deshalb für H_2 - N_2 Gemische in Abbildungen 2.6

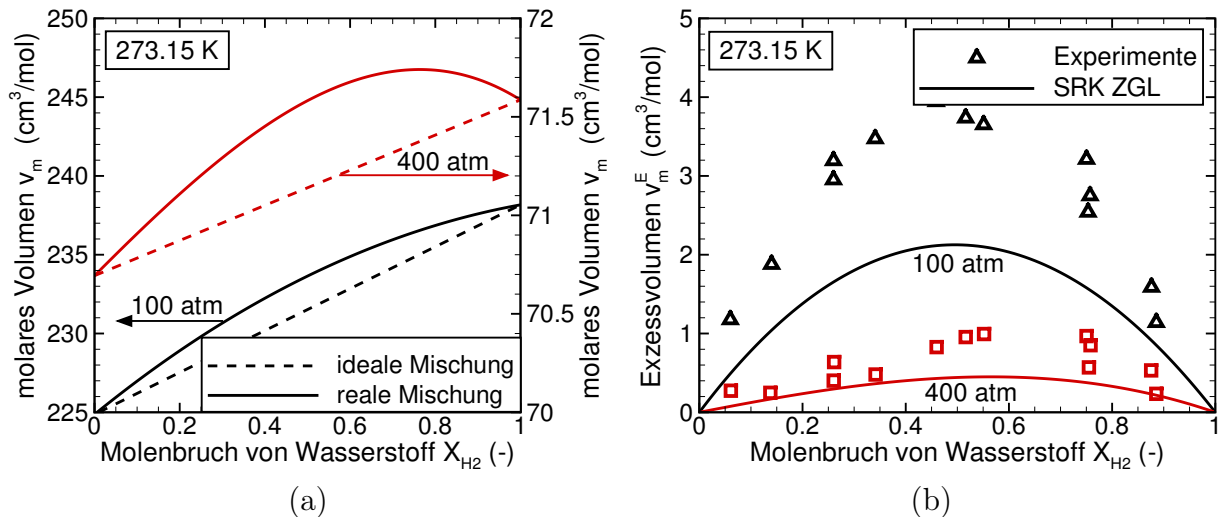


Abbildung 2.6: Mit SRK Zustandsgleichung berechnetes molares Volumen einer H_2 - N_2 Mischung und Vergleich mit idealer Mischungsregel (a) sowie Vergleich des mit der SRK Zustandsgleichung berechneten Exzessvolumens mit experimentellen Werten (entnommen aus Deiters et al. (1993) [41]) (b).

und 2.7 gezeigt.

Abbildungen 2.6(a) und 2.7(a) zeigen jeweils bei unterschiedlichen Drücken das molare Volumen (bei 273,15 K) bzw. die molare Enthalpie (bei 200 K) einer realen und einer idealen Mischung in Abhängigkeit des H_2 -Molenbruchs. Werte einer realen Mischung ergeben sich direkt aus der SRK Zustandsgleichung. Werte einer idealen Mischung berechnen sich aus dem mit dem Molanteil gewichteten arithmetischen Mittel der Werte eines realen Reinstoffes¹⁵. Der Unterschied beider Werte ist das molare Exzessvolumen v_m^E bzw. die molare Exzessenthalpie h_m^E . Das nichtlineare Mischungsverhalten in beiden Größen ist offensichtlich und steht im Kontrast zum Verhalten idealer Gase. Die zugehörigen Exzessgrößen sind in Abb. 2.6(b) und 2.7(b) dargestellt. Ein Vergleich mit gemessenen Werten offenbart eine in der Regel gute Genauigkeit der verwendeten SRK Zustandsgleichung über einen weiten Druck- und Mischungsbereich.

2.3 Zustandsgleichungen

Für die mathematische Beschreibung von Fluiden werden sogenannte Zustandsgleichungen verwendet. Von diesen findet sich in der Literatur eine Vielzahl unterschiedlicher Komplexität, Genauigkeit und Formen wie Aktivitätsmodelle, Exzess-Gibbs-Energie Modelle, Helmholtz-Residuumsfunktionen usw. (Poling et al. (2001) [176], Michelsen und Møllerup (2007) [144], Wei und Sadus (2000) [238]). Einige Zustandsgleichungen wie die Virialgleichung können nur

¹⁵ Die Werte der Reinstoffe werden also mit der SRK Zustandsgleichung berechnet. Anschließend werden die Werte der Mischung aus diesen Werten unter Anwendung der Mischungsregel für ideale Gase bestimmt.

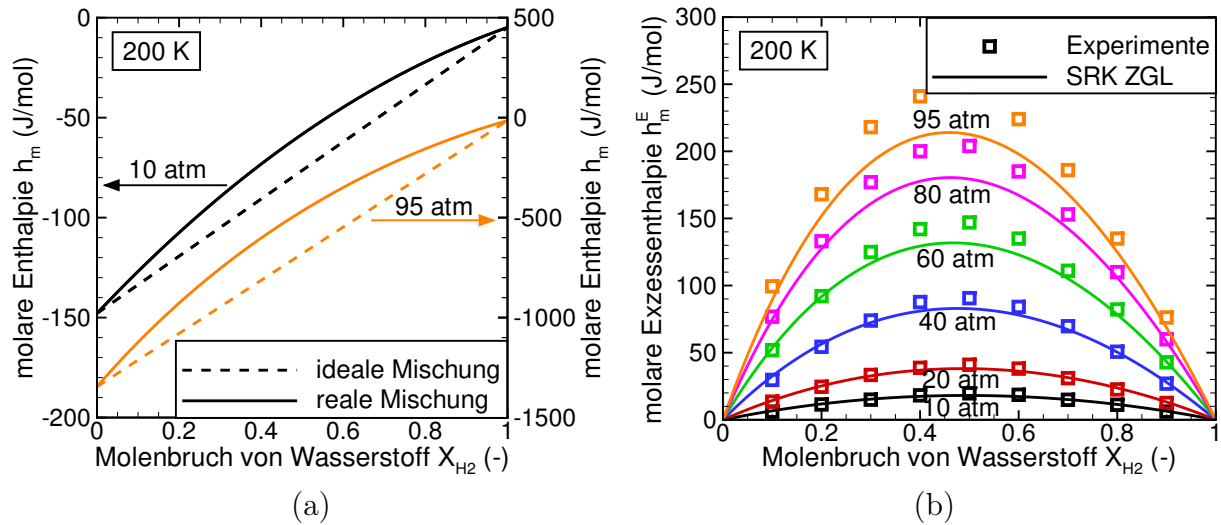


Abbildung 2.7: Mit SRK Zustandsgleichung berechnete molare Enthalpie einer H_2-N_2 Mischung und Vergleich mit idealer Mischungsregel (a) sowie Vergleich der mit der SRK Zustandsgleichung berechneten Exzessenthalpie mit experimentellen Werten (entnommen aus Deiters et al. (1993) [41]) (b).

einen eingeschränkten thermodynamischen Bereich (z. B. nur Gas- oder Flüssigphase) darstellen. Andere Zustandsgleichungen beruhen auf sehr komplexen Modellen (z. B. UNIFAC Gruppenbeitragsmethode) oder sind rechenintensive, mehrtermige Ausdrücke mit empirisch gefitteten Koeffizienten, welche nur für eine einzige Spezies gültig sind (z. B. modifizierte Benedict-Webb-Rubin Zustandsgleichung mit 32 Termen). Für CFD Simulationen, in denen sowohl Gebiete mit flüssigen und transkritischen sowie gasförmigen und überkritischen Zuständen¹⁶ simuliert werden sollen und in denen die Zustandsgleichung in jedem Zeitschritt in jeder Rechenzelle ausgewertet werden muss, empfiehlt sich die Verwendung einer einfachen, recheneffizienten und dennoch hinreichend genauen Zustandsgleichung, welche alle thermodynamischen Gebiete für Reinstoffe und Mischungen abdecken kann. Dadurch wird auch ein konsistenter Übergang zwischen allen thermodynamischen Bereichen gewährleistet. Zudem wird die Komplexität (in der Implementierung) nicht weiter erhöht und eine effiziente Simulation ermöglicht. In vielen Veröffentlichungen zu inerten und reagierenden CFD-Simulationen mit überkritischen Fluiden werden aus diesen Gründen ebenso wie in dieser Arbeit sogenannte kubische Zustandsgleichungen verwendet (z. B. Bellan (2006) [10], Cutrone et al. (2006) [36], Meng und Yang (2003), Petit et al. (2013) [169], Pohl et al. (2013) [174]).

2.3.1 Kubische Zustandsgleichungen für Reinstoffe

Die einfachste kubische Zustandsgleichung, welche qualitativ die Beschreibung von gas- und flüssigförmigen Fluiden erlaubt, ist die schon 1873 von van der Waals (vdW) aufgestellte,

¹⁶ Eventuell sogar Zwei- und Mehrphasengebiete.

gleichnamige Gleichung (van der Waals (1873) [224]):

$$\text{vdW ZGL : } p = \frac{R_u T}{v_m - b} - \frac{a}{v_m^2}. \quad (2.3.1)$$

Diese stellt eine wegweisende Verbesserung der idealen Gasgleichung (Glg. (2.1.1)) durch die Einführung zweier entscheidender Änderungen dar. Zum einen wird mit dem sogenannten „Kovolumen“ b ein Parameter eingeführt, der das Eigenvolumen der Moleküle berücksichtigt, welches bei hohen Dichten nicht mehr vernachlässigbar ist. Zum anderen werden über einen weiteren Term mit dem Parameter a nun nicht mehr nur die abstoßenden, sondern auch die anziehenden, zwischenmolekularen Kräfte wie van-der-Waals-Kräfte und Dipol-Dipol-Wechselwirkungen mit einbezogen. Dieser Term nimmt quadratisch mit dem Volumen ab und stimmt somit mit der molekularen Betrachtung des Lennard-Jones-Potentials (Jones (1924) [89]) überein, dem zufolge die anziehenden, intermolekularen Kräfte mit dem Abstand r der Moleküle voneinander zur sechsten Potenz abnehmen ($r^6 = (r^3)^2 \sim v_m^2$).

Im Laufe der Zeit kamen zahlreiche Erweiterungen der van der Waals Gleichung hinzu. Heute noch wegen ihrer Recheneffizienz und oft hinreichenden Genauigkeit verwendete Zustandsgleichungen sind jene von Soave (1972) [202] sowie Peng und Robinson (1976) [167], welche hier mit SRK und PR abgekürzt werden. Beide führen eine Temperaturabhängigkeit in den Parameter a ein, wodurch sich insbesondere die Genauigkeit zur Vorhersage des Dampfdrucks wesentlich verbesserte:

$$\text{SRK ZGL : } p = \frac{R_u T}{v_m - b} - \frac{a(T)}{v_m (v_m + b)}, \quad (2.3.2)$$

$$\text{PR ZGL : } p = \frac{R_u T}{v_m - b} - \frac{a(T)}{v_m^2 + 2v_m b - b^2}. \quad (2.3.3)$$

Der temperaturabhängige Parameter a für die in dieser Arbeit verwendete, modifizierte SRK Zustandsgleichung wird beschrieben durch

$$a(T) = a_{\text{cr}} \alpha(T), \quad (2.3.4)$$

$$\alpha(T) = \left[1 + \kappa \left(1 - \sqrt{T_r} \right) \right]^2 + \varepsilon_\alpha \quad (2.3.5)$$

$$\text{mit } \kappa = 0,480 + 1,574 \varpi - 0,176 \varpi^2$$

$$\text{und } a_{\text{cr}} = a(T_{\text{cr}}), \alpha(T_{\text{cr}}) = 1.$$

Der speziesabhängige azentrische Faktor ϖ (Pitzer et al. (1955) [172]) ist ein Maß für die Abweichung eines Moleküls von einem unpolaren Molekül mit idealer Kugelform und für monoatome Moleküle nahe Null. Entsprechende Werte für in dieser Arbeit verwendete Spezies finden sich in Tab. D.1. Der Parameter ε_α wurde in dieser Arbeit der ursprünglichen Formulierung hinzugefügt, um für Mischungen differenzierbare α -Funktionen zu erhalten und

damit numerische Schwierigkeiten zu vermeiden. Detailliertere Informationen hierzu folgen im nächsten Unterkapitel über kubische Zustandsgleichungen für Mischungen. In der Literatur findet sich eine Vielzahl weiterer α -Funktionen (Poling et al. (2001) [176], Valderrama (2003) [222]), welche die Genauigkeit der Zustandsgleichung in Teilbereichen weiter verbessern können. Es ist zu beachten, dass α -Funktionen einer Zustandsgleichung speziell für diese entwickelt sind und nicht mit anderen Zustandsgleichungen kombiniert werden können!

Weitere Verbesserungen der Zustandsgleichungen können durch eine sogenannte Volumenkorrektur erzielt werden (Whitson und Brulé (2000) [241]). Man erhält beispielhaft die SRK Zustandsgleichung mit Volumenkorrektur (SRKmVK ZGL), auch Volumentranslation genannt:

$$\text{SRKmVK ZGL : } p = \frac{R_u T}{\dot{v}_m - b} - \frac{a(T)}{\dot{v}_m (\dot{v}_m + b)} \quad \text{mit } v_m = \dot{v}_m - c. \quad (2.3.6)$$

Der zusätzliche Parameter c verschiebt das ursprüngliche p - v_m -Diagramm um dessen Betrag entlang der v_m -Achse. Die p - T Dampfdruckkurve bei Reinstoffen und darüberhinaus die Speziesverteilung in Zwei- oder Mehrphasengemischen bleiben von dieser Änderung unberührt. Während der Einfluss auf das vorhergesagte Volumen der gasförmigen Phase (außer nahe am kritischen Punkt) nur gering ist, da hier in der Regel $c \ll v_m$, können mit dieser Maßnahme deutliche Verbesserungen bei der Vorhersage der Dichte in der Flüssigphase erzielt werden.

Auch die Einführung einer Temperaturabhängigkeit in weiteren Parametern (Lin et al. (1996) [122]) oder gar deren Abhängigkeit vom Volumen (Frey et al. (2013) [51]) kann eine weitere Verbesserung bringen. Hierbei stellt jedoch die schnell anwachsende Komplexität eine Herausforderung dar. Zudem kann es leicht zu unphysikalischen Effekten wie das Kreuzen von Isothermen (engl.: isotherm crossing) oder negativen Wärmekapazitäten kommen, was es beim Entwickeln entsprechender Modelle zu vermeiden gilt (Michelsen und Møllerup (2007) [144], Privat et al. (2012) [180]).

In dieser Arbeit kommt ausschließlich die SRK Zustandsgleichung (mit Volumenkorrektur) zum Einsatz. Zur Vollständigkeit der Zustandsgleichung gehört noch die Bestimmung der darin vorkommenden Parameter a , b und gegebenenfalls c . Für einen Reinstoff α können die speziesabhängigen Parameter $a = a_\alpha$ und $b = b_\alpha$ aus dem kritischen Druck und der kritischen Temperatur der jeweiligen Spezies gewonnen werden (siehe Anhang C). $c = c_\alpha$ kann testfallspezifisch gewählt werden. Mischungen werden im nachfolgenden Unterkapitel behandelt.

2.3.2 Kubische Zustandsgleichungen für Mischungen

Für Mischungen ergeben sich die Zustandsgleichungsparameter mittels sogenannter Kombinations- und Mischungsregeln (engl.: combining and mixing rules) aus den mit dem Molenbruch gewichteten Werten der Reinstoffe (Poling et al. (2001) [176]). Diese Regeln können für die

Vorhersagegenauigkeit in Mischungen eine ebenso große Rolle spielen wie die Wahl der Zustandsgleichung an sich. Insbesondere Variablen, deren Berechnung auf sogenannten partiellen Größen beruht (siehe Abschnitt 2.4.2.3), sind diesbezüglich sensitiv.

Die gebräuchlichste Mischungsregel zur Bestimmung eines Mischungsparameters ϕ ist ein quadratisches Mittel (Poling et al. (2001) [176]):

$$\phi = \sum_{\alpha=1}^{N_{\text{sp}}} \sum_{\beta=1}^{N_{\text{sp}}} X_{\alpha} X_{\beta} \phi_{\alpha\beta} \quad , \quad \phi = a, b, c. \quad (2.3.7)$$

Die Kombinationsparameter $\phi_{\alpha\beta}$ gehen aus Kombinerungsregeln hervor, von denen zwei sehr häufig verwendete Formen das arithmetische bzw. geometrische Mittel der Parameter der Reinstoffe sind:

$$\phi_{\alpha\beta} = \left(\frac{\phi_{\alpha} + \phi_{\beta}}{2} \right) k_{\alpha\beta}, \quad (2.3.8)$$

$$\phi_{\alpha\beta} = (\phi_{\alpha} \phi_{\beta})^{1/2} l_{\alpha\beta}. \quad (2.3.9)$$

Letzteres wird in der Regel für den Parameter a verwendet, während ersteres gemeinhin für die Berechnung der weiteren Parameter Anwendung findet. Die beiden zusätzlichen Größen $k_{\alpha\beta}$ und $l_{\alpha\beta}$ bezeichnen sogenannte binäre Interaktionsparameter. Diese können an experimentelle Messwerte binärer Phasendiagramme angepasst werden, um die Vorhersage des Mischungsverhaltens weiter zu verbessern. In dieser Arbeit wird aufgrund einer unzureichenden experimentellen Datenlage und zur Reduzierung der Komplexität auf dieses Vorgehen verzichtet und beide Parameter werden für alle Spezieskombinationen zu $k_{\alpha\beta} = l_{\alpha\beta} = 1$ festgelegt. Setzt man mit dieser Annahme die Kombinationsparameter aus Glg. (2.3.8) bzw. (2.3.9) in Glg. (2.3.7) ein, so erhält man vereinfachte und deutlich recheneffizientere Mischungsregeln, welche die Kombinationsregeln implizit enthalten. In dieser Arbeit ergeben sich die Mischungsregeln dann zu

$$a = \left(\sum_{\alpha=1}^{N_{\text{sp}}} X_{\alpha} a_{\alpha}^{1/2} \right)^2, \quad (2.3.10)$$

$$b = \sum_{\alpha=1}^{N_{\text{sp}}} X_{\alpha} b_{\alpha}, \quad (2.3.11)$$

$$c = \sum_{\alpha=1}^{N_{\text{sp}}} X_{\alpha} c_{\alpha}. \quad (2.3.12)$$

Wie zuvor bereits erwähnt, wurde die α -Funktion für Reinstoffe in Glg. (2.3.5) leicht durch den Parameter ε_{α} modifiziert, welcher in dieser Arbeit auf den Wert 10^{-4} gesetzt wurde. Abbildung 2.8 zeigt die originale und modifizierten α -Funktionen von H_2 und O_2 , deren kombinierte Funktion $\alpha_{\text{H}_2, \text{O}_2}$ nach Glg. (2.3.9) sowie die resultierende α -Funktion einer äqui-

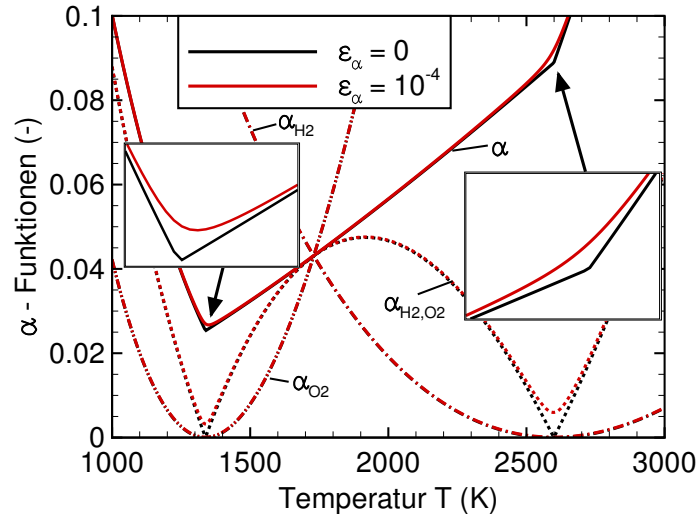


Abbildung 2.8: α -Funktionen für H_2 und O_2 , deren kombinierte Funktion $\alpha_{\text{H}_2,\text{O}_2}$ sowie die α -Funktion einer äquimolaren H_2 - O_2 Mischung für die SRK Zustandsgleichung ohne ($\varepsilon_\alpha = 0,0$) und mit ($\varepsilon_\alpha = 10^{-4}$) Korrektur.

molaren Mischung beider Stoffe nach Glg. (2.3.10). Während die α -Funktionen der Reinstoffe stetig differenzierbar sind, ist dies für die kombinierte α -Funktion und die α -Funktion der Mischung an denjenigen Stellen, an welchen die α -Funktionen der Reinstoffe die y-Achse tangieren, nicht der Fall. Durch Hinzufügen des Korrekturfaktors ε_α in Glg. (2.3.5) wird ein stetig differenzierbarer Verlauf sichergestellt.

2.3.3 Bestimmung des molaren Volumens

Die Bezeichnung „kubisch“ für die hier aufgeführten Zustandsgleichungen resultiert daher, dass sich - wenn mit dem Hauptnenner durchmultipliziert - eine Gleichung dritten Grades in v_m ergibt. Im p - v_m Diagramm für Reinstoffe (Abb. 2.1(a)) und Mischungen (Abb. 2.4(b)) stellen sich die so ergebenden Isothermen im Bereich des Zweiphasengebiets zunächst als die gestrichelt dargestellten Kurven dar. Diese Abschnitte der Isothermen, bei Reinstoffen auch van-der-Waals-Schleife genannt (O’Connell und Haile (2005) [159]), stellen wie schon in Abschnitt 2.1 erwähnt einen metastabilen oder zum Teil sogar instabilen, unphysikalischen Zustand dar. Das tatsächliche, physikalische Verhalten, dargestellt durch die durchgezogen gezeichneten Isothermen im Bereich des Zweiphasengebiets in Abbildungen 2.1(a) und 2.4(b), ergibt sich aus zusätzlichen, thermodynamischen Zusammenhängen.

Zunächst wird hierzu ein Reinstoff betrachtet. Bei unterkritischen Temperaturen treten Bereiche des Drucks auf, in denen bei kubischen Gleichungen drei Lösungen des molaren Volumens die Zustandsgleichung erfüllen. Diese können effizient mittels der Methode von Cardano (Herbison (1994) [76]) bestimmt werden (siehe Anhang B). Der Bereich mit multiplen Lösungen ist

bei konstanter Temperatur durch die Extrema der Spinodalen begrenzt¹⁷ (siehe Abb. 2.1(a)). Die mittlere Lösung ist stets unphysikalisch, da hier $(\partial p / \partial \rho)_T = 1 / (\partial \rho / \partial p)_T < 0$ gilt, d. h. das Fluid würde sich mit zunehmendem Druck bei konstanter Temperatur ausdehnen. In der Realität zerfällt das Fluid stattdessen spontan in zwei Phasen. Die thermodynamisch konsistente Lösung der beiden anderen Möglichkeiten (hier mit Index 1 und 2 gekennzeichnet) stellt diejenige dar, welche die niedrigste (molare) Gibbs-Energie g_m aufweist¹⁸. Dafür wird die Differenz der reduzierten molaren Gibbs-Energie beider möglicher Lösungen bei gleichem Druck und gleicher Temperatur betrachtet:

$$\Delta_g := \frac{g_{m,2}(T,p) - g_{m,1}(T,p)}{R_u T} = (\psi_2 - \psi_1) + (Z_2 - Z_1) - \ln \left(\frac{Z_2}{Z_1} \right). \quad (2.3.13)$$

Falls $\Delta_g > 0$, dann ist $v_{m,1}$ die richtige Lösung, ansonsten $v_{m,2}$. Die Größe ψ stellt die reduzierte molare Helmholtz-Residuumsfunktion dar, welche in Abschnitt 2.4.2 eingeführt wird. Für die SRKmVK Zustandsgleichung ist der ausgewertete Ausdruck von Glg. (2.3.13) am Ende von Anhang A zu finden.

Für Mischungen, welche sich im thermodynamisch stabilen, einphasigen Bereich befinden, ist das Vorgehen analog zu dem der Reinstoffe. Ob Einphasigkeit vorliegt, kann mittels einer Stabilitätsanalyse festgestellt werden (Michelsen (1982) [145]). Das Volumen der Mischung und die Verteilung der Spezies auf die verschiedenen Phasen im Falle eines Aufspaltens in zwei oder mehrere Phasen kann durch eine sogenannte Tp -Flash-Rechnung ermittelt werden (Michelsen (1982) [146]). Beide Methoden nutzen in der Berechnung die sogenannten Fugazitäten bzw. Fugazitätskoeffizienten, welche ebenfalls in Abschnitt 2.4.2 eingeführt werden. Zwei- und Mehrphaseneffekte werden in dieser Arbeit aufgrund der Komplexität und des extrem erhöhten Rechenaufwandes nicht berücksichtigt. Der interessierte Leser findet hierzu jedoch umfangreiche Information in der gängigen Literatur (z. B. Michelsen (1982) [145, 146], Michelsen und Mollerup (2007) [144], Whitson und Brulé (2000) [241]).

2.4 Thermodynamische Formeln und Begriffe

Zur vollständigen, mathematischen Beschreibung des thermodynamischen Verhaltens von Reinstoffen und Gemischen mittels Zustandsgleichungen werden thermodynamische Beziehungen benötigt, welche allgemeingültig und unabhängig von der verwendeten Zustandsgleichung sind. Aufbauend auf Beziehungen für ideale Gase (Abschnitt 2.4.1) kann mit diesen das Verhalten realer Fluide beschrieben werden (Abschnitt 2.4.2).

¹⁷ Exakt an den Extrema fallen zwei Lösungen zusammen, so dass sich nur zwei voneinander unterscheidbare Lösungen ergeben.

¹⁸ Wird exakt der Sättigungsdampfdruck bei gegebener Temperatur gewählt, ist die Lösung uneindeutig. Das Fluid zerfällt spontan in eine Flüssig- und eine Gasphase, welche als molares Volumen die jeweiligen Lösungen der kubischen Gleichung besitzen. Das gemittelte Volumen des Zweiphasengemisches kann jedoch nicht bestimmt werden.

2.4.1 Thermodynamische Beschreibung idealer Gase

Die mathematische Beschreibung realer Fluide baut auf den Modellen zur Vorhersage idealer Gase auf, indem lediglich Abweichungen zwischen dem Verhalten idealer Gase und realer Fluide berechnet werden. Dieses Vorgehen hat den Vorteil, dass der Idealgasanteil unabhängig vom Realgasanteil modelliert und validiert werden kann. Neben dem idealen Gasgesetz (Glg. (2.1.1)) und der Stoffwertberechnung, welche in Abschnitt 2.5 behandelt wird, werden für eine vollständige thermodynamische Beschreibung idealer Gase und Gasgemische für jede Komponente α lediglich noch die (molaren) spezifischen Wärmekapazitäten bei konstantem Druck $c_{p,m,\alpha}^{\text{iG}}$ und die Enthalpien $h_{m,\alpha}^{\text{iG}}$ sowie für reagierende Strömungen zusätzlich die Entropien $s_{m,\alpha}^{\text{iG}}$ bei Idealgasbedingungen benötigt. Die rein temperaturabhängigen, molaren Größen der Reinstoffe bzw. Komponenten einer Mischung weisen folgende Zusammenhänge auf¹⁹:

$$c_{p,m,\alpha}^{\text{iG}} = c_{p,m,\alpha}^{\text{iG}}(T), \quad (2.4.1)$$

$$h_{m,\alpha}^{\text{iG}}(T) - h_{m,\alpha}^{\text{iG}}(T_{\text{ref}}) = \int_{T_{\text{ref}}}^T c_{p,m,\alpha}^{\text{iG}}(T') dT', \quad (2.4.2)$$

$$s_{m,\alpha}^{\text{iG},0}(T) - s_{m,\alpha}^{\text{iG},0}(T_{\text{ref}}) = \int_{T_{\text{ref}}}^T \frac{c_{p,m,\alpha}^{\text{iG}}(T')}{T'} dT', \quad (2.4.3)$$

$$s_{m,\alpha}^{\text{iG}}(T, p, \{X_\alpha\}) = s_{m,\alpha}^{\text{iG},0}(T) - R_u \ln \left(\frac{X_\alpha p}{p_0} \right). \quad (2.4.4)$$

Ein ' indiziert in den Integralen die Integrationsvariable. $h_{m,\alpha}^{\text{iG}}(T_{\text{ref}})$ ist die Standardbildungsenthalpie der Spezies α bei einer Referenztemperatur T_{ref} , welche gewöhnlich bei 298,15 K liegt. Für Moleküle in ihrer natürlichen Form bei Referenzbedingungen (z. B. H_2 , O_2 etc.) ist diese definitionsgemäß gleich 0 J/mol. $s_{m,\alpha}^{\text{iG},0}(T)$ ist die molare Entropie der Spezies α beim Referenzdruck p_0 . Dieser wird meistens zu 1 bar gesetzt²⁰. Die molare Wärmekapazität bei konstantem Volumen ergibt sich aus

$$c_{v,m,\alpha}^{\text{iG}} = c_{p,m,\alpha}^{\text{iG}} - R_u. \quad (2.4.5)$$

Die entsprechenden Größen eines idealen Gasgemisches berechnen sich aus den molgewichteten arithmetischen Mitteln zu

$$c_{p,m}^{\text{iG}} = \sum_{\alpha=1}^{N_{\text{sp}}} X_\alpha c_{p,m,\alpha}^{\text{iG}}, \quad h_m^{\text{iG}} = \sum_{\alpha=1}^{N_{\text{sp}}} X_\alpha h_{m,\alpha}^{\text{iG}}, \quad s_m^{\text{iG}} = \sum_{\alpha=1}^{N_{\text{sp}}} X_\alpha s_{m,\alpha}^{\text{iG}}. \quad (2.4.6)$$

¹⁹ In Glg. (2.4.4) muss X_α nach unten begrenzt werden (z. B. $\max(X_\alpha, 10^{-20})$), damit für den Grenzfall einer verschwindenden Spezies in der Mischung der Logarithmus definiert ist.

²⁰ Häufig findet sich auch $p_0 = 1 \text{ atm} = 1,01325 \text{ bar}$ in der Literatur und in Datenbanken, was entsprechend zu berücksichtigen ist.

Die jeweiligen massenbezogenen Größen können wiederum aus den molaren Größen durch Division mit dem entsprechenden Molekulargewicht (der jeweiligen Komponente bzw. Mischung) gewonnen werden.

Die Werte für $c_{p,m,\alpha}^{\text{iG}}$, $h_{m,\alpha}^{\text{iG}}$ und $s_{m,\alpha}^{\text{iG},0}$ können z. B. aus Experimenten und molekulardynamischen Simulationen gewonnen werden. In vielen Datenbanken, wie der in dieser Arbeit verwendeten NASA-Datenbank (McBride et al. (2001) [136]), werden die Größen jeder Spezies als temperaturabhängige Polynome dargestellt, was eine effiziente Berechnung ermöglicht. Für die verwendeten NASA-Polynome ergibt sich folgende Form²¹:

$$\frac{c_{p,m}^{\text{iG}}}{R_u} = \frac{a_{-2}}{T^2} + \frac{a_{-1}}{T} + a_0 + a_1 T + a_2 T^2 + a_3 T^3 + a_4 T^4, \quad (2.4.7)$$

$$\frac{h_m^{\text{iG}}}{R_u T} = \frac{-a_{-2}}{T^2} + \frac{a_{-1}}{T} \ln T + a_0 + \frac{a_1}{2} T + \frac{a_2}{3} T^2 + \frac{a_3}{4} T^3 + \frac{a_4}{5} T^4 + \frac{b_1}{T}, \quad (2.4.8)$$

$$\frac{s_m^{\text{iG},0}}{R_u} = -\frac{1}{2} \frac{a_{-2}}{T^2} - \frac{a_{-1}}{T} + a_0 \ln T + a_1 T + \frac{a_2}{2} T^2 + \frac{a_3}{3} T^3 + \frac{a_4}{4} T^4 + b_2. \quad (2.4.9)$$

Die Polynome werden in der Regel für zwei oder mehrere Temperaturintervalle (oft 200 K - 1000 K und 1000 K - 6000 K) angegeben, wobei die Kurven stetig und differenzierbar ineinander übergehen. Die angegebene 9-Koeffizienten Form entspricht der aktuellen Version der Datenbank. Die früher verwendete 7-Koeffizienten Form ist ebenfalls durch Gleichungen (2.4.7) - (2.4.9) mit $a_{-2} = a_{-1} = 0$ gegeben. Ein Vorteil der neuen Datenbankversion mit neun Koeffizienten ist eine teilweise verbesserte Datenbasis. Die Genauigkeit der Kurvenfits mit der 7-Koeffizienten Form liegt in der Regel bei 0,1 % - 1 %, die der 9-Koeffizienten Form etwa eine bis zwei Größenordnungen darunter (Goos und Burcat (2012) [62]). Beides ist jedoch unter Beachtung von Unsicherheiten in der zugrundeliegenden Datenbasis sowie der numerischen Fehler und Unwägbarkeiten in der Modellierung von Strömungen ausreichend in CFD-Simulationen.

Aus Gründen der Recheneffizienz ist die 7-Koeffizienten Form in CFD-Codes zu bevorzugen. Aus diesem Grund wurden die Vorteile der neueren Datenbankversion und der recheneffizienteren 7-Koeffizienten Form kombiniert, indem mit Hilfe des Programms PAC (McBride und Gordon (1992) [135]) aus der 9-Koeffizienten Form eine 7-Koeffizienten Form erstellt wurde. Die Abweichungen zu Werten der 9-Koeffizienten Form bewegen sich dabei im Bereich kleiner 0,1 %. Die so erhaltenen Koeffizienten sind im Anhang in Tab. D.2 zu finden.

Da in Brennkammersimulationen mit kryogener Einspritzung auch sehr niedrige Temperaturen auftreten, welche unterhalb der Minimaltemperatur des gefitteten Temperaturbereichs liegen, wurden zusätzliche Temperaturintervalle für den darunter liegenden Temperaturbereich (in der Regel < 200 K) bestimmt. Dabei wurde $c_{p,m,\alpha}^{\text{iG}}$ als konstant angenommen und auf

²¹ Der Index α für Reinstoffe wurde der Übersichtlichkeit halber weggelassen. Für Mischungen gelten die gleichen Ausdrücke, wobei sich die Koeffizienten der Mischung als molgewichtetes arithmetisches Mittel der Koeffizienten der Reinstoffe nach Glg. (2.4.6) ergeben.

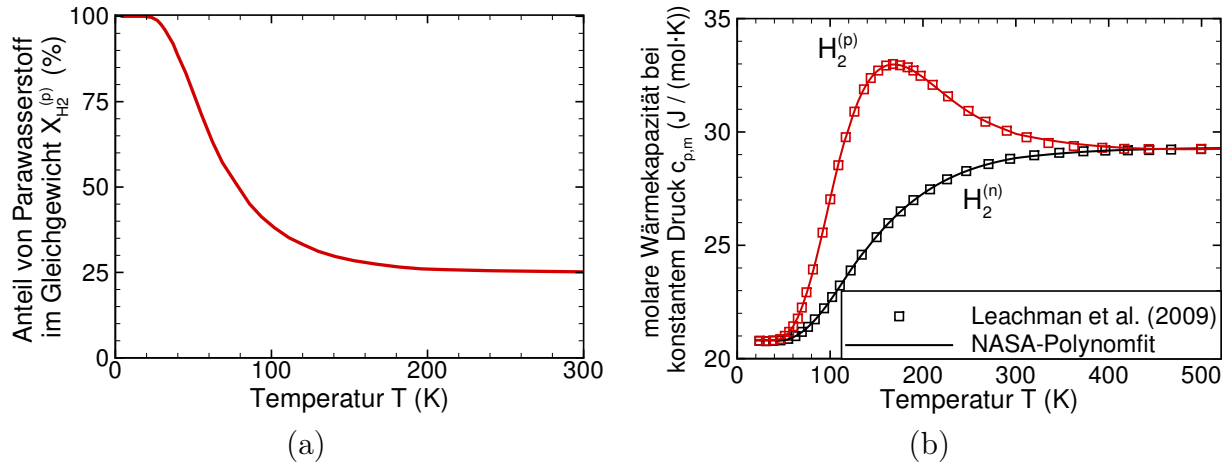


Abbildung 2.9: Anteil von $H_2^{(p)}$ im thermodynamischen Gleichgewicht in Abhängigkeit der Temperatur nach Häussinger et al. (2000) [71] (a) und Vergleich gefitteter molarer Wärmekapazitäten von $H_2^{(n)}$ und $H_2^{(p)}$ mit Korrelationen von Leachman et al. (2009) [104] (b).

den Wert der bis dato niedrigsten gefitteten Temperatur gesetzt. Unter Einbeziehung der Relationen (2.4.2) und (2.4.3) ergibt sich damit auch für $h_{m,\alpha}^{iG}$ und $s_{m,\alpha}^{iG,0}$ ein konsistenter Verlauf (im Gegensatz zur Verwendung einer reinen Temperaturlimitierung). Für viele Gase ist die Annahme eines konstanten Wertes für $c_{p,m,\alpha}^{iG}$ unter 200 K gerechtfertigt, da hier nur noch die translatorischen Freiheitsgrade der Moleküle einen nennenswerten Beitrag liefern und somit in guter Näherung gilt $c_{v,m,\alpha}^{iG}/R_u = c_{p,m,\alpha}^{iG}/R_u - 1 = 3/2$ (Lal et al. (2010) [102]). Für die bei der H_2 - O_2 Verbrennung auftretenden Radikale O, OH, HO_2 und H_2O_2 wird bei niedrigen Temperaturen durch die NASA-Polynome ein teilweise abweichendes Verhalten beschrieben (hier nicht dargestellt). Da Radikale in signifikanten Konzentrationen jedoch erst bei sehr hohen Temperaturen entstehen, können Unsicherheiten in diesem Bereich vernachlässigt werden.

Eine besondere Stellung nimmt H_2 als Quantengas bei niedrigen Temperaturen ein (Häussinger et al. (2000) [71]). Bei Raumtemperatur und darüber liegt im thermodynamischen Gleichgewicht sogenannter Normalwasserstoff ($H_2^{(n)}$) vor, welcher zu 25 % aus Parawasserstoff ($H_2^{(p)}$) und zu 75 % aus Orthowasserstoff ($H_2^{(o)}$) besteht. Wird die Temperatur (sehr langsam) abgesenkt, wird $H_2^{(o)}$ in $H_2^{(p)}$ umgewandelt. Der Anteil von $H_2^{(p)}$ im thermodynamischen Gleichgewicht (sog. Gleichgewichtswasserstoff) ist in Abb. 2.9(a) dargestellt. Bei sehr niedrigen Temperaturen, wie sie für die Lagerung von H_2 auch in der Raumfahrt Anwendung finden, liegt fast ausschließlich $H_2^{(p)}$ vor. Die Umwandlungsraten zwischen beiden Wasserstoffarten ist temperaturabhängig und findet ohne Anwesenheit eines Katalysators vor allem im gasförmigen Zustand nur extrem langsam im Bereich einiger Tage / Wochen statt (Häussinger et al. (2000) [71]). Für Simulationen von Raketenbrennkammern, bei denen H_2 bei kryogenen Temperaturen gelagert (und eingespritzt) wird, ist deshalb davon auszugehen, dass reines $H_2^{(p)}$ vorliegt.

Die beiden Wasserstoffarten unterscheiden sich durch die Richtung ihrer Kernspins zueinan-

der und besitzen leicht unterschiedliche Stoffdaten wie kritische Temperatur und Verdampfungsenthalpie. Die Umwandlung von $\text{H}_2^{(o)}$ in $\text{H}_2^{(p)}$ ist zudem exotherm, was vor allem bei der Lagerung von H_2 eine wichtige Rolle spielt (Häussinger et al. (2000) [71]). Größere Unterschiede ergeben sich in den Wärmekapazitäten sowie in der damit verknüpften Wärmeleitfähigkeit (siehe auch Abschnitt 2.5.1.1). Abbildung 2.9(b) zeigt die gefitteten Wärmekapazitäten von $\text{H}_2^{(n)}$ und $\text{H}_2^{(p)}$ bei niedrigen Temperaturen, welche aus Korrelationen von Leachman et al. (2009) [104] gewonnen wurden. $\text{H}_2^{(p)}$ zeigt hierbei ein für andere Moleküle untypisches Verhalten mit einem lokalen Maximum.

Um eine einheitliche Implementierung für alle Spezies zu erhalten, wurden für $\text{H}_2^{(n)}$ und $\text{H}_2^{(p)}$ die Korrelationen von Leachman et al. (2009) [104] für den niederen Temperaturbereich zusammen mit Hochtemperaturdaten von Woolley et al. (1948) [244] kombiniert und in der 7-Koeffizienten Polynomform abgelegt. Wegen der stark nichtlinearen Abhängigkeit von der Temperatur mussten für den Bereich $T < 300$ K jeweils zwei zusätzliche Temperaturintervalle hinzugefügt werden, um eine ausreichende Genauigkeit zu gewährleisten.

Der Koeffizient b_1 in Glg. (2.4.8) wurde für $\text{H}_2^{(n)}$ und $\text{H}_2^{(p)}$ entsprechend angepasst, um die Standardbildungsenthalpie $h_{m,\alpha}^{\text{IG}}(298,15 \text{ K}) = 0 \text{ J/mol}$ zu erhalten. Die Entropieoffsets beim Referenzdruck $s_{m,\alpha}^{\text{IG},0}(298,15 \text{ K})$ können aus Quantenmechanikrechnungen gewonnen werden. Woolley et al. (1948) [244] geben hier Werte von $33,963 \text{ J}/(\text{cal} \cdot \text{K})$ für $\text{H}_2^{(n)}$ und $31,108 \text{ J}/(\text{cal} \cdot \text{K})$ für $\text{H}_2^{(p)}$ an. Die NASA-Datenbank unterscheidet nicht zwischen den Wasserstoffarten und liefert einen Wert von $31,23 \text{ J}/(\text{cal} \cdot \text{K})$. In den Hochdruck-Reaktionsmechanismen für die H_2 - O_2 Verbrennung von Li et al. (2004) [119] und Burke et al. (2012) [18] wird der Wert $31,21 \text{ J}/(\text{cal} \cdot \text{K})$ angegeben. Ó Conaire et al. (2004) [158] verwenden in ihrem Reaktionsmechanismus den Wert $31,256 \text{ J}/(\text{cal} \cdot \text{K})$, allerdings bei 300 K. Um für Verbrennungssimulationen ein konsistentes Modell zu erhalten, wurde für beide Wasserstoffarten der Wert von $s_{m,\alpha}^{\text{IG},0}(298,15 \text{ K})$ mittels des Koeffizienten b_2 aus Glg. (2.4.9) auf den Wert von Li et al. (2004) [119] und Burke et al. (2012) [18] gesetzt. Dies ergibt einen Wert von $31,252 \text{ J}/(\text{cal} \cdot \text{K})$ bei 300 K in den gefitteten 7-Koeffizienten Polynomen, was sehr gut mit dem Wert von Ó Conaire et al. (2004) [158] übereinstimmt.

2.4.2 Thermodynamische Beschreibung realer Fluide

Zur mathematischen Beschreibung von nichtidealen (realen) Fluiden werden einige thermodynamische Begrifflichkeiten und Konzepte wie das thermodynamische Potential, Residuumfunktionen und partielle Größen benötigt. Diese werden in diesem Abschnitt zunächst eingeführt, bevor anschließend auf die Berechnung thermodynamischer Variablen eingegangen wird, welche sich mittels partieller Ableitungen der Helmholtz-Residuumfunktion darstellen lassen.

Die nachfolgende mathematische Darstellung der Thermodynamik orientiert sich eng an je-

ner von Michelsen und Mollerup (2007) [144]. Diese ermöglicht eine strukturierte, effiziente, modulare und damit flexible Implementierung. Eine thermodynamisch konsistente Implementierung im gesamten CFD-Code kann somit leicht verifiziert werden. Da die Berechnung der thermodynamischen Größen zunächst auf Basis extensiver sowie intensiver, molarer Größen erfolgt, im CFD Code jedoch intensive, massen- bzw. dichte-basierte Variablen verwendet werden, muss zwischen beiden Formulierungen noch eine Verbindung hergestellt werden. Auf eine detaillierte Herleitung aller thermodynamischer Zusammenhänge wird in dieser Arbeit verzichtet, jedoch können diese der gängigen Literatur (z. B. Michelsen und Mollerup (2007) [144]) entnommen bzw. können die entsprechenden Formeln daraus abgeleitet werden.

2.4.2.1 Thermodynamische Potentiale

Ein System ohne externe Kräfte, welches sich im thermodynamischen Gleichgewicht befindet, wird durch die Zustandsgröße der inneren Energie E als Funktion ihrer „natürlichen“, extensiven Variablen Entropie S , Volumen V und Speziesstoffmengen n_α ($\alpha = 1, \dots, N_{\text{sp}}$) eindeutig beschrieben:

$$E = E(S, V, \{n_\alpha\}). \quad (2.4.10)$$

Diese sogenannte Fundamentalgleichung der Thermodynamik enthält die gesamte thermodynamische Information eines Systems. Neben der inneren Energie E gibt es weitere, sogenannte thermodynamische Potentiale wie die Enthalpie H , die Gibbs-Energie G sowie die Helmholtz-Energie A , welche über die Zusammenhänge

$$H = H(S, p, \{n_\alpha\}) = E + pV, \quad (2.4.11)$$

$$G = G(T, p, \{n_\alpha\}) = H - TS, \quad (2.4.12)$$

$$A = A(T, V, \{n_\alpha\}) = E - TS = H - pV - TS \quad (2.4.13)$$

miteinander verknüpft sind. Die unterschiedlichen Potentiale lassen sich durch Legendre-Transformation ineinander überführen (Michelsen und Mollerup (2007) [144]) und sind bezüglich des Informationsgehalts eines thermodynamischen Systems äquivalent. Alle thermodynamischen Potentiale unterscheiden sich in ihrem „natürlichen“ Variablensatz. In der Praxis sind vor allem die Gibbs-Energie und die Helmholtz-Energie von Bedeutung, da ihr „natürlicher“ Variablensatz aus messbaren Größen besteht (Michelsen und Mollerup (2007) [144]). Alle weiteren Größen lassen sich aus den thermodynamischen Potentialen mittels partieller Ableitungen nach ihren jeweiligen „natürlichen“ Variablen gewinnen. So lässt sich beispielsweise der Druck über (Michelsen und Mollerup (2007) [144])

$$p = - \left(\frac{\partial A}{\partial V} \right)_{T, \{n_\alpha\}} \quad (2.4.14)$$

aus der Helmholtz-Energie gewinnen. Tiefgestellte Variablen hinter partiellen Ableitungen kennzeichnen dabei Größen, die konstant gehalten werden.

Umgekehrt kann bei einer gegebenen thermischen, druck-expliciten Zustandsgleichung der Form $p = p(T, V, \{n_\alpha\})$ durch Integration oft ein geschlossener, analytischer Ausdruck für die Helmholtz-Energie hergeleitet werden:

$$A - A_0 = - \int_{V_0}^V \left[p(T, V', \{n_\alpha\}) \right] dV' . \quad (2.4.15)$$

Dabei findet die Integration bei konstanter Temperatur und Stoffzusammensetzung statt. Da keine absoluten Werte, sondern nur Unterschiede für die Helmholtz-Energie angegeben werden können, kann der Referenzzustand (Index 0) frei gewählt werden. Zweckmäßigerweise empfiehlt sich hierfür laut Michelsen und Møllerup (2007) [144] der Zustand eines hypothetischen, idealen Gases bei gegebener Temperatur $T_0 = T$ und unendlicher Verdünnung ($p_0, \rho_0 \rightarrow 0, V_0 \rightarrow \infty$).

2.4.2.2 Residuumsfunktionen

Die Berechnung eines thermodynamischen Potentials $\Pi = A, G, U, H$ für den allgemeinen Zustand $(T, V, \{n_\alpha\})$ eines realen Fluids erfolgt nach Michelsen und Møllerup (2007) [144] in der Regel über sogenannte Residuenfunktionen Π^r (engl.: residual function). Dabei wird die Tatsache ausgenutzt, dass thermodynamische Potentiale Zustandsgrößen sind und damit der Unterschied zwischen zwei Zuständen unabhängig vom Integrationsweg ist. Das Potential $\Pi = \Pi(T, V, \{n_\alpha\})$ kann dann für eine möglichst einfache Integration folgendermaßen dargestellt werden (Michelsen und Møllerup (2007) [144]):

$$\Pi = \Delta\Pi^* + \int_{T_0}^T \left[\left(\frac{\partial \Pi^*}{\partial T'} \right)_{V=\infty, \{n_\alpha\}} \right] dT' + \int_{\infty}^V \left[\left(\frac{\partial \Pi}{\partial V'} \right)_{T, \{n_\alpha\}} \right] dV' . \quad (2.4.16)$$

Der Index * kennzeichnet den Zustand des hypothetischen, idealen Gases. $\Delta\Pi^*$ steht für die Änderung des Potentials durch Mischung der einzelnen Spezies bei $T = T_0$ und unendlicher Verdünnung und ist damit für Reinstoffe gleich einem entsprechenden Referenzwert.

Der „Trick“ besteht nun darin, die rechte Seite in Glg. (2.4.16) in zwei Anteile aufzuteilen: den Anteil eines idealen Gases bei gleichen Bedingungen $(T, V, \{n_\alpha\})$ und eine Abweichung vom Verhalten eines idealen Gases, den Residuenanteil. Das Potential ergibt sich dann zu (Michelsen und Møllerup (2007) [144])

$$\Pi(T, V, \{n_\alpha\}) = \Pi^*(T, V, \{n_\alpha\}) + \Pi^r(T, V, \{n_\alpha\}) \quad (2.4.17)$$

mit dem Idealgasanteil

$$\Pi^{\text{iG}}(T, V, \{n_\alpha\}) = \Pi^* = \Delta \Pi^* + \int_{T_0}^T \left[\left(\frac{\partial \Pi^*}{\partial T'} \right)_{V=\infty, \{n_\alpha\}} \right] dT' + \int_{\infty}^V \left[\left(\frac{\partial \Pi^*}{\partial V'} \right)_{T, \{n_\alpha\}} \right] dV' \quad (2.4.18)$$

und dem Residuenanteil²²

$$\Pi^{\text{r}}(T, V, \{n_\alpha\}) = \int_{\infty}^V \left[\left(\frac{\partial \Pi}{\partial V'} \right)_{T, \{n_\alpha\}} - \left(\frac{\partial \Pi^*}{\partial V'} \right)_{T, \{n_\alpha\}} \right] dV' . \quad (2.4.19)$$

Für die Helmholtz-Energie einer Mischung kann mit Hilfe von Glg. (2.4.13), des idealen Gasgesetzes sowie der Enthalpien und Entropien der Mischung bei Idealgasbedingungen leicht folgender Zusammenhang für den Idealgasanteil gewonnen werden:

$$A^{\text{iG}}(T, V, \{n_\alpha\}) = H^{\text{iG}}(T, \{n_\alpha\}) - nR_{\text{u}}T - TS^{\text{iG}}(T, V, \{n_\alpha\}) . \quad (2.4.20)$$

Die Enthalpie eines idealen Fluids ist vom Druck bzw. Volumen unabhängig. Der Residuenanteil für die Helmholtz-Energie ergibt sich mit Glg. (2.4.14) und dem idealen Gasgesetz zu (Michelsen und Møllerup (2007) [144])

$$\begin{aligned} A^{\text{r}}(T, V, \{n_\alpha\}) &= \int_{\infty}^V \left[\left(\frac{\partial A}{\partial V'} \right)_{T, \{n_\alpha\}} - \left(\frac{\partial A^*}{\partial V'} \right)_{T, \{n_\alpha\}} \right] dV' \\ &= - \int_{\infty}^V \left[p(T, V', \{n_\alpha\}) - p^{\text{iG}}(T, V', \{n_\alpha\}) \right] dV' \\ &= - \int_{\infty}^V \left[p(T, V', \{n_\alpha\}) - \frac{nR_{\text{u}}T}{V'} \right] dV' . \end{aligned} \quad (2.4.21)$$

Durch Einsetzen einer thermischen Zustandsgleichung der Form $p = p(T, V, \{n_\alpha\})$ und Auswertung des Integrals erhält man die Helmholtz-Residuenfunktion A^{r} . Für die ideale Gasgleichung ergibt sich selbstverständlich $A^{\text{r}} \stackrel{\text{iG}}{=} 0$.

²² Ähnlich lässt sich vorgehen, wenn das Potential beim Zustand $(T, p, \{n_\alpha\})$ gesucht ist. Dies führt auf analoge Ausdrücke wie zuvor, jedoch wird das hypothetische ideale Gas dann bei gleichem Druck anstatt gleichem Volumen betrachtet. Die entsprechende Abweichungsfunktion (engl.: departure function) unterscheidet sich z. B. für die Helmholtz-Energie um den Betrag $nR_{\text{u}}T \ln Z$ (Michelsen und Møllerup (2007) [144]). In der Literatur werden häufig beide Ausdrücke synonym verwendet, so dass hier Vorsicht geboten ist.

2.4.2.3 Partielle Größen

Neben den Residuenfunktionen spielen sogenannte partielle Größen eine wichtige Rolle bei der Berechnung thermodynamischer Eigenschaften von Gemischen unter Realgasbedingungen. Die partielle molare Größe $\check{\phi}_\alpha$ (engl.: partial molar property) und die partielle massenbehaftete Größe $\hat{\phi}_\alpha$ (engl.: partial mass property) einer Komponente α in einer Mischung stellen die Änderung der externen Größe Φ in einem System dar, wenn eine infinitesimal kleine Menge der Spezies α dem System hinzugefügt wird, während Druck, Temperatur und alle anderen Speziesmengen konstant gehalten werden. Mathematisch lässt sich dies folgendermaßen ausdrücken (Michelsen und Møllerup (2007) [144]):

$$\check{\phi}_\alpha = \check{\phi}_\alpha(T, p, \{n_\beta\}) := \left(\frac{\partial \Phi}{\partial n_\alpha} \right)_{T, p, \{n_{\beta \neq \alpha}\}}, \quad (2.4.22)$$

$$\hat{\phi}_\alpha = \hat{\phi}_\alpha(T, p, \{m_\beta\}) := \left(\frac{\partial \Phi}{\partial m_\alpha} \right)_{T, p, \{m_{\beta \neq \alpha}\}}. \quad (2.4.23)$$

Zu beachten ist an dieser Stelle, dass die Molen- und Massenbrüche aller Spezies dabei nicht konstant bleiben. Außerdem sind die partiellen molaren bzw. massenbehafteten Größen abhängig von Temperatur, Druck und Spezieszusammensetzung. Die extensive Gesamtgröße des Systems Φ ergibt sich dann aufgrund des Euler-Theorems über homogene Funktionen (Michelsen und Møllerup (2007) [144]) als mol- bzw. massengewichtetes Mittel der jeweiligen partiellen Größen:

$$\Phi = \sum_{\alpha=1}^{N_{\text{sp}}} n_\alpha \check{\phi}_\alpha = \sum_{\alpha=1}^{N_{\text{sp}}} m_\alpha \hat{\phi}_\alpha. \quad (2.4.24)$$

Die entsprechenden, intensiven, molaren bzw. massenbehafteten Größen werden analog aus den molen- bzw. massenbruchgewichteten Mitteln berechnet:

$$\phi_m = \frac{\Phi}{n} = \sum_{\alpha=1}^{N_{\text{sp}}} X_\alpha \check{\phi}_\alpha = \sum_{\alpha=1}^{N_{\text{sp}}-1} X_\alpha (\check{\phi}_\alpha - \check{\phi}_{N_{\text{sp}}}) + \check{\phi}_{N_{\text{sp}}}, \quad (2.4.25)$$

$$\phi = \frac{\phi_m}{M_w} = \frac{\Phi}{m} = \sum_{\alpha=1}^{N_{\text{sp}}} Y_\alpha \hat{\phi}_\alpha = \sum_{\alpha=1}^{N_{\text{sp}}-1} Y_\alpha (\hat{\phi}_\alpha - \hat{\phi}_{N_{\text{sp}}}) + \hat{\phi}_{N_{\text{sp}}}. \quad (2.4.26)$$

Aus den Gleichungen (2.4.25), (2.4.26) und (2.2.4) ist leicht der Zusammenhang zwischen partiellen molaren und massenbehafteten Größen ersichtlich:

$$\hat{\phi}_\alpha = \check{\phi}_\alpha / M_{w,\alpha}. \quad (2.4.27)$$

Für ideale Gase und reale Reinstoffe entsprechen die partiellen molaren bzw. massenbehafteten Größen gerade den molaren bzw. massenbezogenen Größen ($\check{\phi}_\alpha \equiv \phi_{m,\alpha}$, $\hat{\phi}_\alpha \equiv \phi_\alpha$).

2.4.2.4 Chemisches Potential, Fugazitäten und Fugazitätskoeffizienten

Das chemische Potential einer Spezies α in einer Mischung ist folgendermaßen definiert (Michelsen und Mollerup (2007) [144]):

$$\begin{aligned}\mu_\alpha &:= \check{g}_\alpha = \left(\frac{\partial G}{\partial n_\alpha} \right)_{T,p,\{n_{\beta \neq \alpha}\}} = \left(\frac{\partial A}{\partial n_\alpha} \right)_{T,V,\{n_{\beta \neq \alpha}\}} \\ &= \left(\frac{\partial E}{\partial n_\alpha} \right)_{S,V,\{n_{\beta \neq \alpha}\}} = \left(\frac{\partial H}{\partial n_\alpha} \right)_{S,p,\{n_{\beta \neq \alpha}\}}.\end{aligned}\quad (2.4.28)$$

Der Ableitungsausdruck der Gibbs-Energie ist die gebräuchlichste Definition. Jedoch ist die äquivalente Definition über die Helmholtz-Energie zweckmäßiger. Das chemische Potential μ_α , gleich der partiellen molaren Gibbs-Energie \check{g}_α , dient unter anderem zur Beschreibung des thermodynamischen Gleichgewichtszustandes. Für ein homogenes, geschlossenes System aus N_{sp} Komponenten ist derjenige Zustand stabil, welcher die Gibbs-Energie bei konstantem Druck und konstanter Temperatur minimiert. Ist der einphasige Zustand instabil, zerfällt das System spontan in zwei oder mehrere Phasen. Für diesen Fall sind die Temperatur und der Druck in allen Phasen gleich groß. Zudem gilt für jede Spezies, dass ihr jeweiliges chemisches Potential in jeder Phase gleich groß ist.

Für ideale Gase geht das thermodynamische Potential in die molare Gibbs-Energie der jeweiligen Spezies über:

$$\mu_\alpha = \check{g}_\alpha \stackrel{\text{iG}}{=} g_{\text{m},\alpha}^{\text{iG}} = h_{\text{m},\alpha}^{\text{iG}} - T s_{\text{m},\alpha}^{\text{iG}} = g_{\text{m},\alpha}^{\text{iG},0} + R_{\text{u}} T \ln \left(\frac{X_\alpha p}{p_0} \right). \quad (2.4.29)$$

Dabei bildet $g_{\text{m},\alpha}^{\text{iG},0}$ den rein temperaturabhängigen Anteil. Für den Fall einer verschwindend geringen Menge einer Komponente α ist das chemische Potential nicht wohl definiert, da $\lim_{X_\alpha \rightarrow 0} \mu_\alpha \rightarrow -\infty$. Für die Beschreibung realer Fluide wird deshalb besser die Fugazität f_α bzw. der dimensionslose Fugazitätskoeffizient φ_α verwendet. Diese sind wie folgt definiert (Michelsen und Mollerup (2007) [144]):

$$R_{\text{u}} T \ln \varphi_\alpha := R_{\text{u}} T \ln \frac{f_\alpha}{X_\alpha p} := \mu_\alpha - \mu_\alpha^{\text{iG}} = \check{g}_\alpha^{\text{r}} = \check{a}_\alpha^{\text{r}} - R_{\text{u}} T \ln Z \quad (2.4.30)$$

mit der partiellen molaren Helmholtz-Residuumsfunktion $\check{a}_\alpha^{\text{r}}$. Die Ausdrücke sind nun unabhängig vom Referenzdruck p_0 und wohl definiert. Für ideale Gase gilt

$$f_\alpha \stackrel{\text{iG}}{=} X_\alpha p \quad \text{und} \quad \varphi_\alpha \stackrel{\text{iG}}{=} 1. \quad (2.4.31)$$

2.4.2.5 Abgeleitete Größen aus der reduzierten Helmholtz-Residuumsfunktion

Im verwendeten CFD-Code TASCOM3D mit Präkonditionierung (Simsont und Gerlinger (2016) [198], siehe Abschnitt 4.1) werden einige thermodynamische Größen benötigt, die sich

konsistent aus der Helmholtz-Residuumsfunktion herleiten lassen. Verwendet man die (molare) reduzierte Helmholtz-Residuumsfunktion

$$n \psi = \Psi(T, V, \{n_\alpha\}) := \frac{A^r(T, V, \{n_\alpha\})}{R_u T} = \frac{n a_m^r(T, v_m, \{X_\alpha\})}{R_u T} \quad (2.4.32)$$

ergeben sich bei der Berechnung oft einfachere Ausdrücke (Michelsen und Møllerup (2007) [144]). Für die SRKmVK Zustandsgleichung ist die reduzierte Helmholtz-Residuumsfunktion in Anhang A gegeben. Es ist anzumerken, dass extensive Größen wie die Stoffmenge n und das Volumen V bei der Berechnung im Code nicht benötigt werden, jedoch in den Zwischenschritten bei der Herleitung benötigter Gleichungen auftreten. Für die in dieser Arbeit auftretenden, abgeleiteten Größen ergeben sich folgende Zusammenhänge, welche in gegebener Reihenfolge ausgewertet werden können und entweder Michelsen und Møllerup (2007) [144] entnommen oder eigenständig hergeleitet wurden:

$$p = -R_u T \left(\frac{\partial \Psi}{\partial V} \right)_{T, \{n_\alpha\}} + \frac{R_u T}{v_m}, \quad (2.4.33)$$

$$\left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_{T, \{n_\alpha\}} = -R_u T \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial V^2} \right)_{T, \{n_\alpha\}} - \frac{R_u T}{n v_m^2}, \quad (2.4.34)$$

$$\left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_{V, \{n_\alpha\}} = -R_u T \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial T \partial V} \right)_{\{n_\alpha\}} + \frac{p}{T}, \quad (2.4.35)$$

$$\left(\frac{\partial p}{\partial n_\alpha} \right)_{T, V, \{n_{\beta \neq \alpha}\}} = -R_u T \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial V \partial n_\alpha} \right)_{T, \{n_{\beta \neq \alpha}\}} + \frac{R_u T}{n v_m}, \quad (2.4.36)$$

$$\check{v}_\alpha := \left(\frac{\partial V}{\partial n_\alpha} \right)_{T, p, \{n_{\beta \neq \alpha}\}} = - \left(\frac{\partial p}{\partial n_\alpha} \right)_{T, V, \{n_{\beta \neq \alpha}\}} / \left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_{T, \{n_\alpha\}}, \quad (2.4.37)$$

$$\ln \varphi_\alpha = \left(\frac{\partial \Psi}{\partial n_\alpha} \right)_{T, V, \{n_{\beta \neq \alpha}\}} - \ln Z, \quad (2.4.38)$$

$$\left(\frac{\partial (\ln \varphi_\alpha)}{\partial T} \right)_{p, \{n_\alpha\}} = \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial T \partial n_\alpha} \right)_{V, \{n_{\beta \neq \alpha}\}} + \frac{1}{T} - \frac{\check{v}_\alpha}{R_u T} \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_{V, \{n_\alpha\}}, \quad (2.4.39)$$

$$\check{h}_\alpha^r = -R_u T^2 \left(\frac{\partial (\ln \varphi_\alpha)}{\partial T} \right)_{p, \{n_\alpha\}}, \quad (2.4.40)$$

$$\check{h}_\alpha = h_{m, \alpha}^{\text{IG}} + \check{h}_\alpha^r, \quad (2.4.41)$$

$$\mu_\alpha^r = \check{g}_\alpha^r = R_u T \ln \varphi_\alpha, \quad (2.4.42)$$

$$\hat{h}_\alpha = \check{h}_\alpha / M_w. \quad (2.4.43)$$

$$\hat{v}_\alpha = \check{v}_\alpha / M_w , \quad (2.4.44)$$

$$\left(\frac{\partial \rho}{\partial v_m} \right)_{\{Y_\alpha\}} = -\frac{M_w}{v_m^2} = -\frac{\rho^2}{M_w} , \quad (2.4.45)$$

$$\left(\frac{\partial v_m}{\partial v} \right)_{\{Y_\alpha\}} = M_w , \quad (2.4.46)$$

$$\left(\frac{\partial \rho}{\partial p} \right)_{T, \{Y_\alpha\}} = \left(\frac{\partial \rho}{\partial p} \right)_{T, \{n_\alpha\}} = 1 / \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_{T, \{n_\alpha\}} = \frac{1}{n} \left(\frac{\partial \rho}{\partial v_m} \right)_{\{Y_\alpha\}} / \left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_{T, \{n_\alpha\}} , \quad (2.4.47)$$

$$\left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_{p, \{Y_\alpha\}} = - \left(\frac{\partial \rho}{\partial p} \right)_{T, \{Y_\alpha\}} \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_{V, \{n_\alpha\}} , \quad (2.4.48)$$

$$\left(\frac{\partial \rho}{\partial Y_\alpha} \right)_{T, p, \{Y_{\beta \neq \alpha}\}} = \left(\frac{\partial \rho}{\partial v_m} \right)_{\{Y_\beta\}} \left(\frac{\partial v_m}{\partial v} \right)_{\{Y_\beta\}} (\hat{v}_\alpha - \hat{v}_{N_{sp}}) , \quad (2.4.49)$$

$$c_v = c_v^{\text{IG}} - \frac{R_u T}{n M_w} \left[T \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial T^2} \right)_{V, \{n_\alpha\}} + 2 \left(\frac{\partial \Psi}{\partial T} \right)_{V, \{n_\alpha\}} \right] , \quad (2.4.50)$$

$$c_p = c_v - \frac{T}{n M_w} \left(\frac{\partial p}{\partial T} \right)_{V, \{n_\alpha\}}^2 / \left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_{T, \{n_\alpha\}} , \quad (2.4.51)$$

$$a_s := \sqrt{\left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_S} = \sqrt{\frac{c_p}{c_v} \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_{T, \{n_\alpha\}}} . \quad (2.4.52)$$

2.4.2.6 Partielle Ableitungen der reduzierten Helmholtz-Residuumfunktion

Zur Berechnung aller Größen im vorherigen Abschnitt werden noch die partiellen Ableitungen der reduzierten Helmholtz-Residuumfunktion benötigt. Für eine strukturierte und effiziente Auswertung wird dazu die Abhängigkeit von der Stoffzusammensetzung aus der Helmholtz-Residuumfunktion vollständig in N_P Zustandsgleichungsparameter (z. B. SRK: $N_P = 2$, SRKmVK: $N_P = 3$) $\{P_p\} = \{P_p(T, V, \{n_\alpha\})\}$ mit $p = 1, \dots, N_P$ transferiert (Michelsen und Mollerup (2007) [144]). Die SRK Zustandsgleichung mit speziesabhängiger, aber sonst konstanter Volumenkorrektur (SRKmVK) hängt beispielsweise von den drei Parametern $P_1 \equiv \mathcal{A}(T, \{n_\alpha\}) := n^2 a$, $P_2 \equiv \mathcal{B}(\{n_\alpha\}) := n b$ und $P_3 \equiv \mathcal{C}(\{n_\alpha\}) := n c$ ab, wobei alle drei von der Zusammensetzung abhängen und \mathcal{A} zusätzlich noch temperaturabhängig ist (siehe Abschnitt 2.3). Die Abhängigkeit der reduzierten Helmholtz-Residuumfunktion lässt

sich dann wie folgt ausdrücken (Michelsen und Mollerup (2007) [144]):

$$\Psi(T, V, \{n_\alpha\}) = \Psi(T, V, n, \{P_p\}) = \Psi(\{\Theta_k\}) \quad (2.4.53)$$

$$\text{mit } \{\Theta_k\} = \{T, V, n, \{P_p\}\} , k = 1, \dots, N_\Theta \text{ und } N_\Theta = N_P + 3.$$

Die partielle Ableitung erster Ordnung von Ψ nach einer Größe y bei konstant gehaltenem Vektor $\{x\}$, welcher Einträge aus Θ_k enthalten kann, ergibt sich dann mit der Kettenregel als (Michelsen und Mollerup (2007) [144])

$$\left(\frac{\partial \Psi}{\partial y}\right)_{\{x\}} = \sum_{k=1}^{N_\Theta} \left(\frac{\partial \Psi}{\partial \Theta_k}\right)_{\{\Theta_{m \neq k}\}} \left(\frac{\partial \Theta_k}{\partial y}\right)_{\{x\}} =: \sum_{k=1}^{N_\Theta} \Psi_{\Theta_k} \Theta_{ky} . \quad (2.4.54)$$

Tiefgestellte Variablen in Ψ_{Θ_k} und Θ_{ky} kennzeichnen wiederum partielle Ableitungen von $\Psi(\{\Theta_k\})$ bzw. $\Theta_k(T, V, n, \{P_p\})$ bei sonst konstant gehaltenem Variablensatz. Die partiellen Ableitungen zweiter Ordnung nach den Variablen y und z bei konstantem Vektor $\{x\}$ schreiben sich nach erneuter Anwendung der Kettenregel als

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial y \partial z}\right)_{\{x\}} &= \sum_{k=1}^{N_\Theta} \sum_{l=1}^{N_\Theta} \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial \Theta_k \partial \Theta_l}\right)_{\{\Theta_{m \neq k, l}\}} \left(\frac{\partial \Theta_k}{\partial y}\right)_{\{x\}} \left(\frac{\partial \Theta_l}{\partial z}\right)_{\{x\}} \\ &\quad + \sum_{k=1}^{N_\Theta} \left(\frac{\partial \Psi}{\partial \Theta_k}\right)_{\{\Theta_{m \neq k}\}} \left(\frac{\partial^2 \Theta_k}{\partial y \partial z}\right)_{\{x\}} \\ &=: \sum_{k=1}^{N_\Theta} \sum_{l=1}^{N_\Theta} \Psi_{\Theta_k \Theta_l} \Theta_{ky} \Theta_{lz} + \sum_{k=1}^{N_\Theta} \Psi_{\Theta_k} \Theta_{kyz} . \end{aligned} \quad (2.4.55)$$

Für die 3-Parameter SRKmVK Zustandsgleichung vereinfachen sich die entsprechenden Ausdrücke wie im Folgenden übersichtlich dargestellt. Für die partiellen Ableitungen erster Ordnung ergibt sich:

$$\left(\frac{\partial \Psi}{\partial T}\right)_{V, \{n_\alpha\}} = \Psi_T + \Psi_{\mathcal{A}} \mathcal{A}_T , \quad (2.4.56)$$

$$\left(\frac{\partial \Psi}{\partial V}\right)_{T, \{n_\alpha\}} = \Psi_V , \quad (2.4.57)$$

$$\left(\frac{\partial \Psi}{\partial n_\alpha}\right)_{T, V, \{n_{\beta \neq \alpha}\}} = \Psi_n + \Psi_{\mathcal{A}} \mathcal{A}_{n_\alpha} + \Psi_{\mathcal{B}} \mathcal{B}_{n_\alpha} + \Psi_{\mathcal{C}} \mathcal{C}_{n_\alpha} . \quad (2.4.58)$$

Für die partiellen Ableitungen 2. Ordnung lauten die benötigten Gleichungen:

$$\left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial T^2}\right)_{V, \{n_\alpha\}} = \Psi_{TT} + 2\Psi_{T\mathcal{A}} \mathcal{A}_T + \Psi_{\mathcal{A}} \mathcal{A}_{TT} , \quad (2.4.59)$$

$$\left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial V^2} \right)_{T, \{n_\alpha\}} = \Psi_{VV} , \quad (2.4.60)$$

$$\left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial T \partial V} \right)_{\{n_\alpha\}} = \Psi_{TV} + \Psi_{VA} \mathcal{A}_T , \quad (2.4.61)$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial T \partial n_\alpha} \right)_{V, \{n_{\beta \neq \alpha}\}} &= \Psi_{TA} \mathcal{A}_{n_\alpha} + \Psi_{TB} \mathcal{B}_{n_\alpha} + \Psi_{TC} \mathcal{C}_{n_\alpha} + \\ &\quad \Psi_{VA} \mathcal{A}_{Tn_\alpha} + \Psi_{VB} \mathcal{B}_{Tn_\alpha} + \Psi_{VC} \mathcal{C}_{Tn_\alpha} , \end{aligned} \quad (2.4.62)$$

$$\left(\frac{\partial^2 \Psi}{\partial V \partial n_\alpha} \right)_{T, \{n_{\beta \neq \alpha}\}} = \Psi_{Vn} + \Psi_{VA} \mathcal{A}_{n_\alpha} + \Psi_{VB} \mathcal{B}_{n_\alpha} + \Psi_{VC} \mathcal{C}_{n_\alpha} . \quad (2.4.63)$$

Die partiellen Ableitungen von Ψ und der Zustandsgleichungsparameter \mathcal{A} , \mathcal{B} und \mathcal{C} für die SRK_{MVK} Zustandsgleichung können wiederum Anhang A entnommen werden.

2.5 Stoffwerte

Neben dem stark unterschiedlichen, thermodynamischen Verhalten realer Fluide gegenüber idealen Gasen müssen auch Abweichungen in den Transportkoeffizienten (Viskosität μ , Wärmeleitfähigkeit λ und binäre Diffusionskoeffizienten $D_{\alpha\beta}$) berücksichtigt werden. Hierzu finden sich in der Literatur zahlreiche Modelle (Poling et al. (2001) [176]). Wie bei den Zustandsgleichungen kann deren Gültigkeitsbereich ebenso auf bestimmte Druck- und Temperaturbereiche, Reinstoffe oder gewisse Komponenten beschränkt sein. Zwei sehr bekannte und für CFD Simulationen oft eingesetzte Modelle zur Vorhersage der Viskosität und Wärmeleitfähigkeit realer Mischungen sind diejenigen von Ely und Hanley (1981, 1983) [44, 45] sowie Chung et al. (1988) [31]. Beide basieren auf dem Prinzip der korrespondierenden Zustände (siehe Abschnitt 2.1) und berechnen μ und λ direkt, ohne auf vorangehende Submodelle zurückzugreifen.

Das in dieser Arbeit verwendete Modell von Huber und Hanley (1996) [82] baut ebenfalls auf dem Prinzip der korrespondierenden Zustände auf. Im Gegensatz zu den beiden anderen Modellen fußt das Huber-und-Hanley-Modell jedoch auf den Werten einer idealen Gasmischung μ^{iG} und λ^{iG} , welche zuvor aus anderen Modellen gewonnen werden müssen. Analog zu den Residuumsfunktionen (siehe Abschnitt 2.4.2.2) berechnet es im Anschluss die Abweichungen zwischen einer realen und einer idealen Mischung. Werden genaue Modelle bzw. gefittete Funktionen zur Berechnung von μ^{iG} und λ^{iG} verwendet, bietet dieses Modell den Vorteil, dass für weite Bereiche in Verbrennungssimulationen, in denen aufgrund der hohen Temperaturen nahezu Idealgasbedingungen vorliegen, eine verbesserte Genauigkeit erzielt werden kann. Die Stoffwerte im Realgas-Code gehen so nahtlos und konsistent in die Werte des Idealgas-Codes über, was für die beiden anderen Modelle nicht gewährleistet ist.

Die Modelle von Ely und Hanley (1981, 1983) [44, 45] sowie Chung et al. (1988) [31] haben als weiteren, entscheidenden Nachteil gegenüber dem Modell von Huber und Hanley (1996) [82], dass sie ohne Anpassungen nicht für den kompletten thermodynamischen Bereich in einer Raketenbrennkammer mit H_2 - O_2 Verbrennung physikalisch sinnvolle Werte liefern. Wie die meisten Modelle, wurden auch diese beiden anhand einer limitierten Anzahl an Spezies (zumeist Kohlenwasserstoffe) und für einen limitierten Druck- und Temperaturbereich entworfen. Es ist deshalb bei Verwendung außerhalb ihres Gültigkeitsbereichs darauf zu achten, diese vor deren Einsatz zumindest auf physikalisch plausibles Verhalten zu überprüfen. So wurde für das Modell von Chung et al. (1988) [31] festgestellt, dass dieses nur für Fluide mit einem positiven azentrischen Faktor anwendbar ist. Um zumindest physikalisch sinnvolle Werte für H_2 mit $\varpi = -0,219$ zu erhalten, muss dessen Wert im Modell auf Null begrenzt werden. Für das Modell von Ely und Hanley (1981, 1983) [44, 45] zeigte sich, dass dieses für hohe reduzierte Temperaturen $T_r = T/T_{\text{cr}}$ einen unphysikalischen Verlauf in μ und λ prognostiziert. Dies betrifft insbesondere, aber nicht ausschließlich, H_2 mit seiner sehr niedrigen kritischen Temperatur von ca. 33 K.

Zur Berechnung der binären Diffusionskoeffizienten in realen Mischungen können die Modelle von Takahashi (1974) [212] sowie Riazi und Whitson (1993) [183] herangezogen werden. Letzteres wurde in einer leicht modifizierten Form in dieser Arbeit verwendet. Beide Modelle berechnen $D_{\alpha\beta}$, ähnlich zum Huber-und-Hanley-Modell für μ und λ , aus der Abweichung zwischen einer realen und einer idealen Mischung, benötigen also ein vorangehendes Modell zur Berechnung der entsprechenden Idealgasdiffusionskoeffizienten $D_{\alpha\beta}^{\text{IG}}$. Bei der Untersuchung beider Modelle stellte sich heraus, dass das Modell von Takahashi (1974) [212] bei niedrigen Temperaturen und hohen Drücken ein unplausibles Verhalten aufzeigt. Insbesondere für unterkritische Temperaturen kann sich sogar ein unphysikalisches Verhalten mit negativen Werten für $D_{\alpha\beta}$ ergeben.

Im Folgenden werden die in dieser Arbeit verwendeten Modelle für die Stoffwertberechnung beschrieben und bewertet. Dabei werden zunächst jeweils die Modelle zur Berechnung der Idealgaswerte der Reinstoffe (Abschnitt 2.5.1) und Gemische (Abschnitt 2.5.2) erläutert. Die darauf aufbauenden Erweiterungen für reale Fluide werden im Anschluss diskutiert (Abschnitt 2.5.3).

An dieser Stelle soll darauf hingewiesen werden, dass bei der Vorhersage der Stoffwerte realer Fluide große Abweichungen zu experimentell bestimmten Werten von 50 % bis 100 % vor allem für polare Fluide wie H_2O vorkommen können, wenn diese nicht speziell in den Modellen berücksichtigt werden. In CFD Simulationen, insbesondere RANS / URANS Simulationen, aber auch LES, wirken sich diese starken Abweichungen jedoch oft nur in geringem Maße aus, da hier der Anteil der aus der Turbulenzmodellierung stammenden turbulenten Viskosität, Wärmeleitfähigkeit und Diffusionskoeffizienten in weiten Bereichen um eine oder mehrere Größenordnungen über deren physikalischen, molekularen Werten liegt. In lokalen Strömungsbereichen mit niedriger Reynoldszahl, z. B. an Wänden, welche diffusions- und

nicht turbulenzdominiert sind, könnte dies jedoch einen entscheidenden Einfluss z. B. auf die Vorhersage des Wandwärmestroms haben. Da dies jedoch testfallspezifisch ist, ist an dieser Stelle keine allgemeingültige Aussage möglich.

2.5.1 Stoffwerte idealer Reinstoffe

Die kinetische Gastheorie (KGT) bietet eine Möglichkeit, für hinreichend dünne Gase die Viskosität μ_α^{ig} und Wärmeleitfähigkeit $\lambda_\alpha^{\text{ig}}$ eines idealen Reinstoffes α zu berechnen (Hirschfelder et al. (1954) [80]). Die Vorhersagegenauigkeit ist in vielen Fällen ausreichend und besonders gut für monoatome und kleine, unpolare Moleküle. Für polare Fluide (z. B. H_2O), langkettige Moleküle mit großem azentrischen Faktor und kleinem kritischen Kompressibilitätsfaktor sowie für Quantengase (z. B. H_2) können sich vor allem hin zu niedrigen Temperaturen stärkere Abweichungen zur Realität ergeben. Das Modell der KGT wird in dieser Arbeit für alle Spezies außer für die Hauptspezies der H_2 - O_2 Verbrennung, also H_2 , O_2 und H_2O , herangezogen. Für diese drei Komponenten wurden spezielle Polynomfits an möglichst hochwertige Datensets und -korrelationen aus der Literatur erstellt. Unabhängig davon wurden die idealen Reinstoffviskositäten und -wärmeleitfähigkeiten aller Spezies in einem den CFD-Simulationen vorgelagerten Schritt berechnet und für eine effiziente Auswertung während der CFD-Simulationen in Polynomform abgespeichert. Nachfolgend soll näher auf die einzelnen Punkte eingegangen werden.

2.5.1.1 Stoffdaten aus kinetischer Gastheorie

Die Gleichung der KGT zur Berechnung der Viskosität eines idealen Reinstoffes schreibt sich als²³ (Hirschfelder et al. (1954) [80])

$$\mu_\alpha^{\text{ig}} = 844,011907 \cdot 10^{-27} \frac{\sqrt{M_{\text{w},\alpha} T}}{\sigma_\alpha^2 \Omega_\alpha^{(2,2)}}. \quad (2.5.1)$$

Das sogenannte Stoßintegral $\Omega_\alpha^{(2,2)}$ hängt von der mit der Boltzmann-Konstante k_B normierten Potentialtopftiefe (engl.: potential well depth) $(\epsilon/k_B)_\alpha$ und der Temperatur ab. Der Stoßdurchmesser (engl.: collision diameter) σ_α und die Potentialtopftiefe $(\epsilon/k_B)_\alpha$ sind die beiden Parameter des Lennard-Jones-Potentials²⁴ und können der Literatur entnommen werden (z. B. CHEMKIN® [24]). Für die in dieser Arbeit vorkommenden Komponenten sind beide Parameter in Tab. D.1 zu finden. Das Stoßintegral selbst ist ein sehr komplexer Aus-

²³ Alle Werte sind in diese Zahlenwertgleichung in SI-Einheiten einzusetzen.

²⁴ Oft findet sich in der Literatur eine Vielzahl an Kombinationen für ϵ/k_B und σ . Diese können stark variieren und dennoch sehr ähnliche Ergebnisse liefern (siehe dazu Bastien et al. (2010) [8]). Für polare Fluide wie Wasser sollten streng genommen Kollisionsintegrale wie das Stockmayer-Potential (Itean et al. (1961) [86], Mourits und Rummens (1977) [150], Mason und Monchick (1962) [129]) verwendet werden, welche intermolekulare Anziehungskräfte aufgrund von Dipolwechselwirkungen berücksichtigen. Es ist darauf zu achten, dass ein konsistenter Satz aus Potentialparametern und Kollisionsintegralen verwendet wird.

druck, welcher numerisch integriert und in Tabellen abgelegt werden kann (Monchick und Mason (1961) [148]). Als recheneffiziente Alternative kann dieses nach Neufeld et al. (1972) [155] aus

$$\Omega_{\alpha}^{(2,2)} = A T_{\alpha}^{*-B} + C \exp(-D T_{\alpha}^*) + E \exp(-F T_{\alpha}^*) \quad \text{mit} \quad T_{\alpha}^* = T / (\epsilon/k_B)_{\alpha} \quad (2.5.2)$$

berechnet werden. T^* ist eine reduzierte Temperatur und die Konstanten sind mit $A = 1,16145$, $B = 0,14874$, $C = 0,52487$, $D = 0,77320$, $E = 2,16178$ und $F = 2,43787$ gegeben. Neufeld et al. (1972) [155] geben den durch diese Approximation erhaltenen Fehler für den Bereich $0,3 < T_{\alpha}^* < 100$ mit kleiner als 0,1 % an.

Für die Berechnung der Wärmeleitfähigkeit eines idealen Reinstoffs wird in dieser Arbeit die Formel von Stiel und Thodos (1964) [207] benutzt:

$$\lambda_{\alpha}^{\text{ig}} = \mu_{\alpha}^{\text{ig}} c_{v,\alpha} \left(1,15 + \frac{2,03}{c_{v,\alpha}/R_{\alpha}} \right) . \quad (2.5.3)$$

Diese stellt einen Kompromiss aus der Eucken und der modifizierten Eucken Formulierung da (Poling et al. (2001) [176]).

2.5.1.2 Stoffdaten aus experimentellen Fits

Für eine verbesserte Genauigkeit wurden für die Hauptspezies der H_2 - O_2 Verbrennung ($\text{H}_2^{(\text{p})}$ bzw. $\text{H}_2^{(\text{n})}$, O_2 und H_2O) Polynomfits an möglichst hoch- und neuwertige Datensets und -korrelationen aus der Literatur erstellt (siehe auch Abschnitt 2.5.1.3).

Für $\text{H}_2^{(\text{p})}$ und $\text{H}_2^{(\text{n})}$ wurden Polynome zur Berechnung der Viskosität (Abb. 2.10(a)) und Wärmeleitfähigkeit (Abb. 2.10(b)) an Korrelationen von Muzny et al. (2013) [153] bzw. Assael et al. (2011) [2] angepasst. Ein Vergleich mit weiteren Daten aus der Literatur von Guevara et al. (1969) [66], Mehl et al. (2010) [137] sowie Saxena und Saxena (1970) [189] offenbart eine hohe Genauigkeit der Polynomfits. Für die Viskosität stimmen die Werte von $\text{H}_2^{(\text{p})}$ und $\text{H}_2^{(\text{n})}$ praktisch überein. Die Wärmeleitfähigkeit ist an die Wärmekapazität gekoppelt (vgl. Glg. (2.5.3)), so dass sich hier erwartungsgemäß Unterschiede bei niedrigen Temperaturen ergeben (siehe Abschnitt 2.4.1). Es zeigte sich, dass die Korrelation von Assael et al. (2011) [2] für $\text{H}_2^{(\text{n})}$ bei hohen Temperaturen ein unphysikalisches Verhalten zeigt. Deshalb wurde für den Polynomfit von $\text{H}_2^{(\text{n})}$ im Hochtemperaturbereich stattdessen die Korrelation von $\text{H}_2^{(\text{p})}$ benutzt. Abbildung (2.10(b)) vergleicht zusätzlich Werte aus der KGT (vgl. Glg. (2.5.3)). Die Wärmeleitfähigkeiten von $\text{H}_2^{(\text{p})}$ und $\text{H}_2^{(\text{n})}$ werden mit dieser vor allem im Hochtemperaturbereich unterschätzt.

Für O_2 wurden Polynomfits an Korrelationen von Lemmon und Jacobsen (2004) [115] erstellt. Ein Vergleich mit weiteren Daten aus der Literatur von Hanley et al. (1974) [69] (siehe Abb. 2.11(a)) bzw. der NIST Thermo Data Engine Datenbank [157] (siehe Abb. 2.11(b))

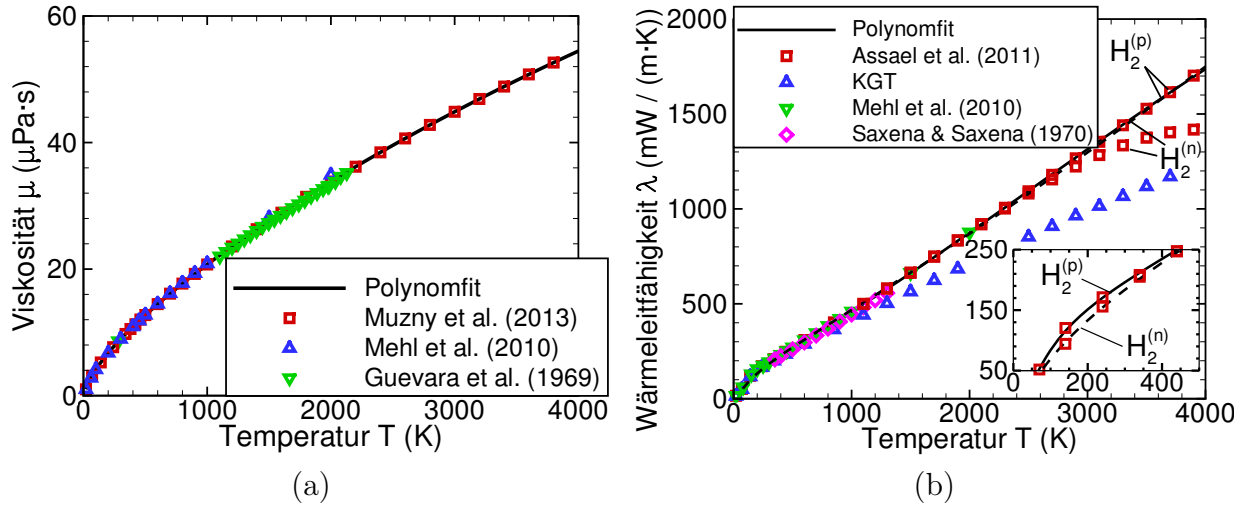


Abbildung 2.10: Vergleich gefitteter Werte der Viskositäten (a) und Wärmeleitfähigkeiten (b) von $\text{H}_2^{(p)}$ und $\text{H}_2^{(n)}$ bei Idealgasbedingungen mit Daten und Korrelationen aus der Literatur (Muzny et al. (2013) [153], Mehl et al. (2010) [137], Guevara et al. (1969) [66], Assael et al. (2011) [2], Saxena und Saxena (1970) [189]) sowie berechneten Werten nach der kinetischen Gastheorie.

lässt wiederum auf eine hohe Qualität der Polynomfits schließen.

Für die Viskosität (siehe Abb. 2.12(a)) und Wärmeleitfähigkeit (siehe Abb. 2.12(b)) von H_2O wurden Polynome an Korrelationen von Huber et al. (2009) [83] bzw. Huber et al. (2012) [84] gefittet. Wiederum ergibt sich eine sehr gute Übereinstimmung mit Daten der NIST Thermo Data Engine Datenbank [157].

2.5.1.3 Polynomfits

Unabhängig vom verwendeten Modell und der Art der Berechnung der Viskositäten und Wärmeleitfähigkeiten der Reinstoffe bei Idealgasbedingungen wurden die sich ergebenden Werte als Polynomfits in der Form

$$\phi = \exp \left(\sum_{i=0}^4 a_i (\ln T)^i \right) , \quad \phi = \mu, \lambda \quad (2.5.4)$$

hinterlegt. Das Polynom kann effizient unter Anwendung des Horner-Schemas ausgewertet werden (Meyberg und Vachenauer (1990) [143]). Für Spezies, deren Werte mittels der KGT berechnet werden (siehe Abschnitt 2.5.1.1), werden die Viskositäten und Wärmeleitfähigkeiten im Temperaturbereich von 50 K bis 4000 K im CFD-Code vorab ermittelt. Die Koeffizienten a_i werden anschließend durch einen Least-Squares-Fit (Methode der kleinsten Quadrate) in einem den CFD-Simulationen vorgelagerten Schritt bestimmt. Für die Hauptspezies $\text{H}_2^{(p)}$ bzw. $\text{H}_2^{(n)}$, O_2 und H_2O werden die Koeffizienten vorab durch Fits an experimentelle Daten und Korrelationen (siehe Abschnitt 2.5.1.2) bestimmt und anschließend vom CFD-Code eingelesen. Die entsprechenden Koeffizienten und deren gültiger Temperaturbereich findet sich

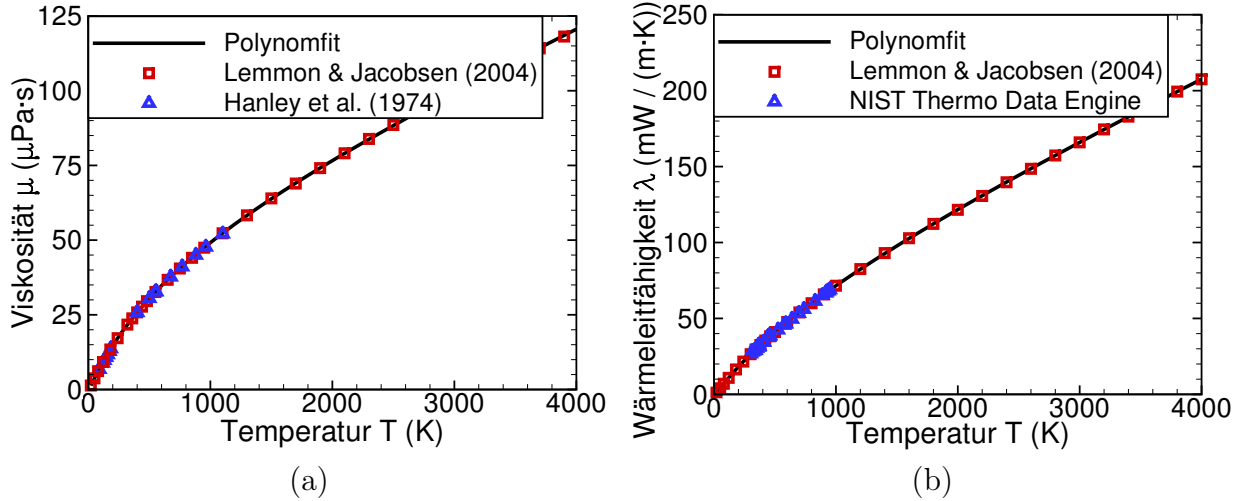


Abbildung 2.11: Vergleich gefitteter Werte der Viskositäten (a) und Wärmeleitfähigkeiten (b) von O_2 bei Idealgasbedingungen mit Daten und Korrelationen aus der Literatur (Lemmon und Jacobsen (2004) [115], Hanley et al. (1974) [69]) und der NIST Thermo Data Engine Datenbank [157].

im Anhang in Tabellen D.3 und D.4. Für die Diffusionskoeffizienten sei an dieser Stelle noch angemerkt, dass keine Polynomfits verwendet wurden, da die Berechnung nach Fuller et al. (1966) [55] effizienter ist.

2.5.2 Stoffwerte idealer Gemische

Die Viskosität und Wärmeleitfähigkeit eines idealen Gasgemisches können aus den molgewichteten Werten der Reinstoffe gewonnen werden. In dieser Arbeit werden dafür die Modelle von Wilke (1950) [243] bzw. Mathur et al. (1967) [131] eingesetzt. Die Viskosität eines dünnen Gasgemisches ergibt sich damit zu

$$\mu^{iG} = \sum_{\alpha=1}^{N_{sp}} \frac{X_{\alpha} \mu_{\alpha}^{iG}}{\sum_{\beta=1}^{N_{sp}} X_{\beta} \phi_{\alpha\beta}} \quad (2.5.5)$$

$$\text{mit } \phi_{\alpha\beta} = \phi_{\beta\alpha} \frac{\mu_{\alpha}^{ig} M_{w,\beta}}{\mu_{\beta}^{ig} M_{w,\alpha}} = \frac{\left[1 + \left(\mu_{\alpha}^{ig} / \mu_{\beta}^{ig} \right)^{1/2} \left(M_{w,\beta} / M_{w,\alpha} \right)^{1/4} \right]^2}{\left[8 \left(1 + M_{w,\alpha} / M_{w,\beta} \right) \right]^{1/2}}.$$

Die Wärmeleitfähigkeit berechnet sich aus

$$\lambda^{ig} = \frac{1}{2} \left[\sum_{\alpha=1}^{N_{sp}} X_{\alpha} \lambda_{\alpha}^{ig} + \left(\sum_{\alpha=1}^{N_{sp}} \frac{X_{\alpha}}{\lambda_{\alpha}^{ig}} \right)^{-1} \right]. \quad (2.5.6)$$

Zur Bewertung der Genauigkeit der verwendeten Mischungsmodelle werden nachfolgend zwei Beispiele gegeben. Abbildung 2.13(a) zeigt mit verschiedenen Modellen berechnete Viskosi-

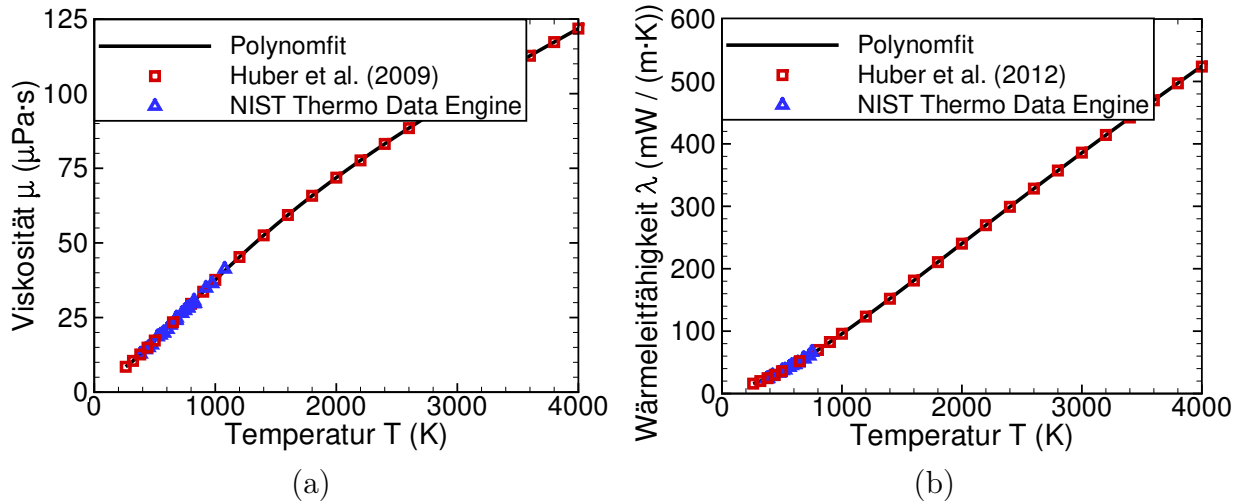


Abbildung 2.12: Vergleich gefitteter Werte der Viskositäten (a) und Wärmeleitfähigkeiten (b) von H₂O bei Idealgasbedingungen mit Daten aus der NIST Thermo Data Engine Datenbank [157].

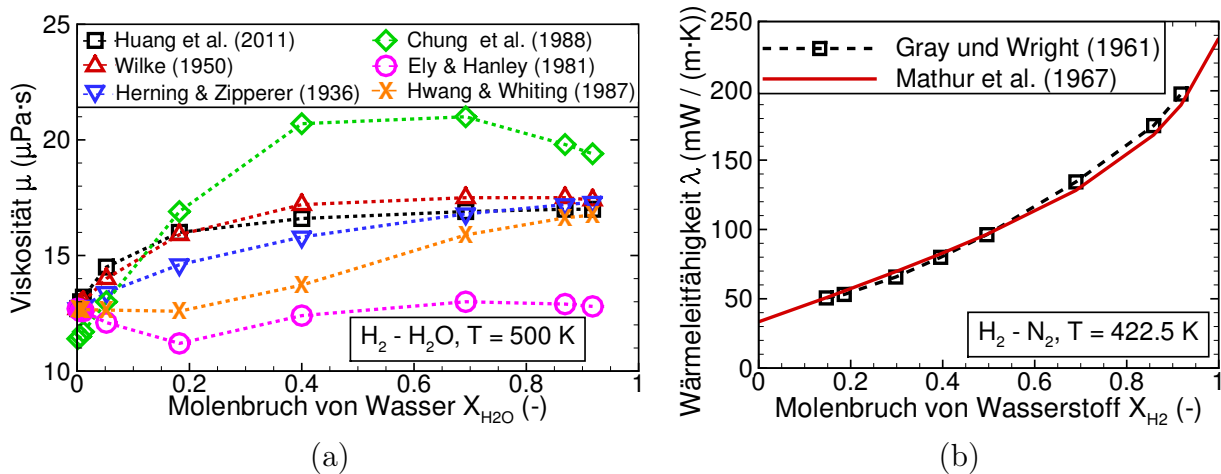


Abbildung 2.13: Vergleich berechneter und experimenteller Viskositäten einer H₂-H₂O Mischung (a) sowie Wärmeleitfähigkeiten einer H₂-N₂ Mischung (b) bei Idealgasbedingungen. Experimentelle Daten wurden Huang et al. (2011) [81] sowie Gray und Wright (1961) [64] entnommen.

täten einer H₂-H₂O Mischung bei $T = 500 \text{ K}$ im Vergleich mit experimentellen Daten von Huang et al. (2011) [81]. Die Werte der Reinstoffe wurden wie zuvor in Abschnitt 2.5.1 beschrieben ermittelt. Das Modell von Wilke (1950) zeigt eine sehr gute Übereinstimmung mit dem Experiment. Die ähnliche, jedoch etwas einfachere Formulierung von Herning und Zipperer (1936) [77] zeigt im Vergleich teilweise stärkere Abweichungen. Die Modelle von Chung et al. (1988) [31] (mit ϖ -Limitierung für H₂) sowie Ely und Hanley (1981) [44] berechnen direkt die Viskosität einer realen Mischung und wurden hier auf eine Mischung bei Idealgasbedingungen angewandt. Die Abweichungen zu den experimentellen Messdaten sind beträchtlich. Das Modell von Hwang und Whiting (1987) [85], welches eine Erweiterung des Modells von Ely und Hanley (1981) [44] für polare Fluide ist, zeigt eine bessere Vorhersage für hohe H₂O-Anteile. Dieses Beispiel zeigt den zuvor erwähnten Vorteil des Modells von Huber und

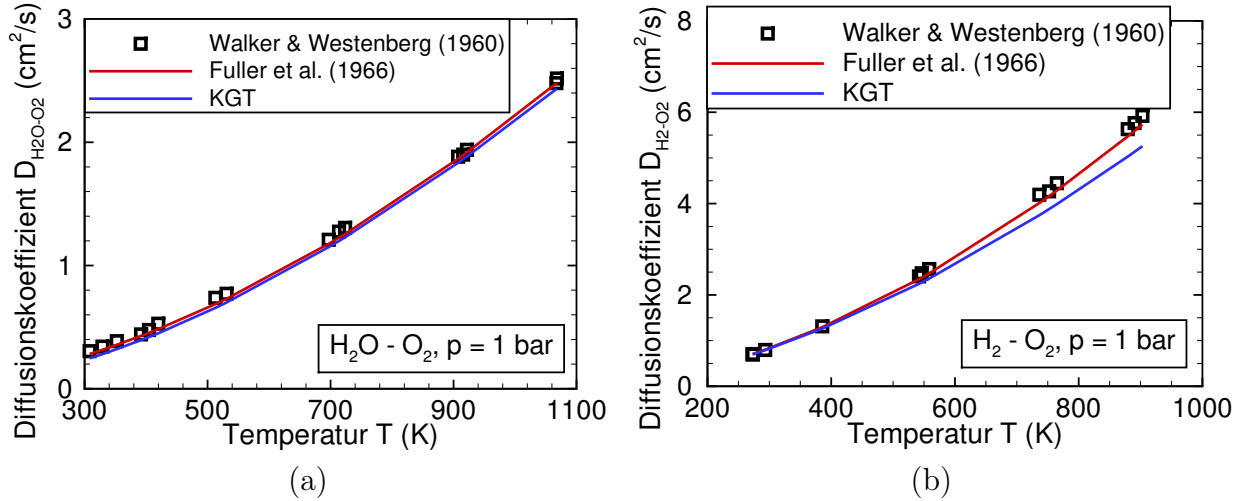


Abbildung 2.14: Vergleich berechneter und experimenteller binärer Diffusionskoeffizienten einer $\text{H}_2\text{O} - \text{O}_2$ Mischung (a) und einer $\text{H}_2 - \text{O}_2$ Mischung (b) bei Idealgasbedingungen. Experimentelle Daten wurden Walker und Westenberg (1960) [233] entnommen.

Hanley (1996) [82] auf, welches bei Idealgasbedingungen in das vorgeschaltete Modell zur Berechnung der Idealgasviskosität, in diesem Fall das Wilke-Modell (Wilke (1950) [243]), übergeht.

Ein analoges Verhalten lässt sich auch für die Wärmeleitfähigkeit beobachten. Einen Vergleich der nach Mathur et al. (1967) [131] berechneten Wärmeleitfähigkeit mit experimentellen Daten zeigt Abb. 2.13(b) für eine $\text{H}_2 - \text{N}_2$ Mischung bei $T = 422,5 \text{ K}$. Die Übereinstimmung mit dem Experiment ist sehr gut. Da die Berechnung der Wärmeleitfähigkeit auf der berechneten Viskosität aufbaut, ergeben sich für die Modelle von Chung et al. (1988) [31] sowie Ely und Hanley (1983) [45] ähnliche Abweichungen wie in Abb. 2.13(a) (hier nicht dargestellt).

Die binären Diffusionskoeffizienten $D_{\alpha\beta}^{\text{ig}}$ eines dünnen Gemisches werden in dieser Arbeit nach dem Modell von Fuller et al. (1966) [55] folgendermaßen berechnet²⁵:

$$(pD_{\alpha\beta})^{\text{ig}} = T^{1,75} d_{\alpha\beta}^{\text{Fuller}} \Leftrightarrow D_{\alpha\beta}^{\text{ig}} = D_{\beta\alpha}^{\text{ig}} = \frac{T^{1,75}}{p} d_{\alpha\beta}^{\text{Fuller}} \quad (2.5.7)$$

$$\text{mit } d_{\alpha\beta}^{\text{Fuller}} = 3,16227766 \cdot 10^{-4} \frac{\sqrt{\frac{M_{w,\alpha} + M_{w,\beta}}{M_{w,\alpha} M_{w,\beta}}}}{\left(\Sigma_{V,\alpha}^{1/3} + \Sigma_{V,\beta}^{1/3}\right)^2}.$$

Dabei ist $\Sigma_{V,\alpha}$ das sogenannte Diffusionsvolumen, welches in Tab. D.1 für die in dieser Arbeit verwendeten Spezies gegeben ist²⁶. Der Ausdruck $d_{\alpha\beta}^{\text{Fuller}}$ muss nur einmal zu Beginn der Simulation ausgewertet werden. Dies erlaubt eine effiziente Berechnung von $D_{\alpha\beta}^{\text{ig}}$.

²⁵ Im Gegensatz zur Originalreferenz wird die Formel hier so angegeben, dass alle Größen in SI-Einheiten gegeben sind.

²⁶ Es wurden hier nicht die Werte aus dem ursprünglichen Paper von Fuller et al. (1966) [55] verwendet, sondern diejenigen aus einer späteren Veröffentlichung (Fuller et al. (1969) [54]).

Abbildungen 2.14(a) und 2.14(b) zeigen einen Vergleich experimentell ermittelter und berechneter Diffusionskoeffizienten eines idealen $\text{H}_2\text{O}-\text{H}_2$ bzw. H_2-O_2 Gemisches. Das Modell von Fuller et al. (1966) [55] deckt sich sehr gut mit den Messdaten von Walker und Westenberg (1960) [233]. Gegenüber der KGT erscheint es etwas genauer und ist zudem effizienter in der Berechnung (auch im Vergleich zur Polynomdarstellung aus Abschnitt 2.5.1.3).

2.5.3 Stoffwerte realer Reinstoffe und Gemische

Die Viskositäten und Wärmeleitfähigkeiten realer Gemische werden in dieser Arbeit mit dem Modell von Huber und Hanley (1996) [82] berechnet. Die Vorteile dieses Modells gegenüber den Modellen von Ely und Hanley (1981, 1983) [44, 45] sowie Chung et al. [31] wurden bereits in den vorangegangenen Abschnitten erläutert. Die Implementierung als Residuumsfunktion orientiert sich in dieser Arbeit an der Darstellung von Poling et al. (2001) [176]²⁷.

Das Modell von Huber und Hanley (1996) [82] basiert auf dem (erweiterten²⁸) Prinzip der korrespondierenden Zustände (Pitzer et al. (1955) [172], Leland und Chappellear (1968) [113]). Dieses besagt, dass sich alle Fluide gleich verhalten, wenn mit auf den kritischen Punkt bezogenen Werten gearbeitet wird (siehe auch Abschnitt 2.1). Die generelle Idee ist es, den Zustand eines Reinstoffes oder einer Mischung auf einen äquivalenten Zustand eines Referenzfluids, in diesem Fall Propan²⁹ (C_3H_8), zurückzuführen. Als Referenzfluid kommen Spezies in Frage, welche sehr gut vermessen sind und für welche eine sehr exakte empirische Korrelation über einen weiten T - p -Bereich angegeben werden kann. Je ähnlicher das betrachtete Fluid bzw. die betrachtete Mischung dem Referenzfluid ist, umso genauere Ergebnisse sind zu erwarten.

Das prinzipielle Vorgehen besteht darin, mit Hilfe sogenannter Formfunktionen (engl.: shape functions) die Temperatur T und Dichte ρ einer Spezies bzw. einer Mischung auf eine äquivalente Temperatur T_0 und ρ_0 abzubilden, bei denen das Referenzfluid bestimmte gleiche Eigenschaften (z. B. Kompressibilitätsfaktor, Viskosität etc.) besitzt wie das betrachtete Fluid (Ely und Hanley (1981, 1983) [44, 45]). In der Regel werden allgemeine Formfunktionen verwendet, welche zwar keine perfekte Korrelation herstellen, aber dafür für alle Fluide und Mischungen gültig sind. Nachfolgend wird das Modell von Huber und Hanley (1996) [82]

²⁷ Die verwendeten Formeln weichen in einigen Punkten von der Darstellung in Huber und Hanley (1996) [82] ab. Laut B. E. Poling (private Kommunikation) bestehen Diskrepanzen zwischen dem von Huber und Hanley verwendeten Computercode TRAPP und den veröffentlichten Formeln in Huber und Hanley (1996) [82]. Die Gleichungen in Poling et al. (2001) [176] sollen jedoch die implementierten Formeln aus TRAPP akkurat wiedergeben.

²⁸ Im erweiterten Modell werden sogenannte Formfunktionen verwendet und teilweise weitere Größen wie der azentrische Faktor oder das Dipolmoment berücksichtigt.

²⁹ Die Eigenschaften von C_3H_8 sind in Tab. D.1 gegeben. Der Vorteil von C_3H_8 gegenüber dem von Ely und Hanley (1981, 1983) [44, 45] verwendeten Methan (CH_4) ist, dass C_3H_8 eine wesentlich niedrigere Erstarrungstemperatur besitzt. Die Anwendung des Prinzips der korrespondierenden Zustände kann bei Verwendung von CH_4 dazu führen, dass die Temperatur T des betrachteten Reinstoffes oder der betrachteten Mischung auf eine für CH_4 äquivalente Temperatur T_0 abgebildet wird, bei der CH_4 jedoch in gefrorenem Zustand vorliegen würde. Die Methode würde bei diesen Bedingungen somit versagen.

kompakt dargestellt.

Als erstes werden für jede Spezies α mit Stoffwerten von C_3H_8 reduzierte Größen (Index \diamond) eingeführt:

$$T_{\text{cr},\alpha}^\diamond = \frac{T_{\text{cr},\alpha}}{T_{\text{cr},\text{C}_3\text{H}_8}} \quad , \quad \rho_{\text{cr},\alpha}^\diamond = \frac{\rho_{\text{cr},\alpha}}{\rho_{\text{cr},\text{C}_3\text{H}_8}} \quad , \quad Z_{\text{cr},\alpha}^\diamond = \frac{Z_{\text{cr},\alpha}}{Z_{\text{cr},\text{C}_3\text{H}_8}} \quad , \quad \varpi_\alpha^\diamond = \varpi_\alpha - \varpi_{\text{C}_3\text{H}_8} . \quad (2.5.8)$$

Diese werden zur Auswertung der Formfunktionen und der daran anknüpfenden Abbildungsfunktionen f_α und h_α herangezogen:

$$f_\alpha = T_{\text{cr},\alpha}^\diamond \underbrace{[1 + \varpi_\alpha^\diamond(0,05203 - 0,7498 \ln T_{\text{r},\alpha})]}_{\text{Formfunktion für } T} , \quad (2.5.9)$$

$$h_\alpha = \frac{1}{\rho_{\text{cr},\alpha}^\diamond} \underbrace{\frac{1}{Z_{\text{cr},\alpha}^\diamond} [1 - \varpi_\alpha^\diamond(0,1436 - 0,2822 \ln T_{\text{r},\alpha})]}_{\text{Formfunktion für } \rho} . \quad (2.5.10)$$

Dabei ist $T_{\text{r},\alpha} = T / T_{\text{cr},\alpha}$ wieder die reduzierte Temperatur. Für Mischungen werden aus den Abbildungsfunktionen der Spezies ähnlich der Kombinationsregeln von Zustandsgleichungen (siehe Abschnitt 2.3.2) kombinierte Abbildungsfunktionen gebildet:

$$f_{\alpha\beta} = (f_\alpha f_\beta)^{1/2} , \quad (2.5.11)$$

$$h_{\alpha\beta} = \frac{1}{8} \left[h_\alpha^{1/3} + h_\beta^{1/3} \right]^3 , \quad (2.5.12)$$

$$M_{\text{w},\alpha\beta} = \frac{2 M_{\text{w},\alpha} M_{\text{w},\beta}}{M_{\text{w},\alpha} + M_{\text{w},\beta}} . \quad (2.5.13)$$

Die Abbildungsfunktionen der Mischung f und h werden im Anschluss wiederum ähnlich der Mischungsregeln von Zustandsgleichungen (siehe Abschnitt 2.3.2) aus den molgewichteten kombinierten Abbildungsfunktionen gewonnen:

$$h = \sum_{\alpha=1}^{N_{\text{sp}}} \sum_{\beta=1}^{N_{\text{sp}}} X_\alpha X_\beta h_{\alpha\beta} , \quad (2.5.14)$$

$$f = h^{-1} \sum_{\alpha=1}^{N_{\text{sp}}} \sum_{\beta=1}^{N_{\text{sp}}} X_\alpha X_\beta f_{\alpha\beta} h_{\alpha\beta} . \quad (2.5.15)$$

Die weiterhin benötigten Parameter F_μ , F_λ und χ_λ werden folgendermaßen berechnet:

$$F_\mu = M_{\text{w},\text{C}_3\text{H}_8}^{-1/2} h^{-2} \sum_{\alpha=1}^{N_{\text{sp}}} \sum_{\beta=1}^{N_{\text{sp}}} X_\alpha X_\beta (f_{\alpha\beta} M_{\text{w},\alpha\beta})^{1/2} h_{\alpha\beta}^{4/3} , \quad (2.5.16)$$

Tabelle 2.1: Konstanten im TRAPP Modell von Huber und Hanley (1996) [82] (aus Poling et al. (2001) [176]).

Index i	1	2	3	4
C_i	-14,113294896	968,22940153	13,686545032	-12511,628378
B_i	15,2583985944	5,29917319127	-3,05330414748	0,450477583739
Index i	5	6	7	
C_i	0,0168910864	43,527109444	7659,4543472	
B_i	1,03144050679	-0,185480417707	-	

$$F_\lambda = M_{w,C_3H_8}^{1/2} h^{-2} \sum_{\alpha=1}^{N_{sp}} \sum_{\beta=1}^{N_{sp}} X_\alpha X_\beta (f_{\alpha\beta}/M_{w,\alpha\beta})^{1/2} h_{\alpha\beta}^{4/3}, \quad (2.5.17)$$

$$\chi_\lambda = \left[1 + \frac{2,1866 (\varpi - \varpi_{C_3H_8})}{1 - 0,505 (\varpi - \varpi_{C_3H_8})} \right]^{1/2} \quad \text{mit} \quad \varpi = \sum_{\alpha=1}^{N_{sp}} X_\alpha \varpi_\alpha. \quad (2.5.18)$$

Aus den Abbildungsfunktionen der Mischung f und h lassen sich nun eine äquivalente Temperatur und Dichte (Index 0) berechnen, bei der die Stoffdaten von C_3H_8 ausgewertet werden:

$$T_0 = T/f, \quad \rho_{m,0} = \rho_m h \cdot 10^{-3} = h/v_m \cdot 10^{-3}. \quad (2.5.19)$$

Der Faktor 10^{-3} stammt daher, dass $\rho_{m,0}$ in den nachfolgenden Formeln in der Einheit mol/l einzusetzen ist. Für alle übrigen Größen werden SI-Einheiten verwendet. Der nächste Schritt besteht nun darin, die Residuumfunktionen

$$\Delta\mu = A_1 \exp [(\rho_{m,0})^{0,1} A_2 + (\rho_{m,0})^{0,5} (\rho_{m,0}^\diamond - 1) A_3] - A_1, \quad (2.5.20)$$

$$\Delta\lambda = B_1 \rho_{m,0}^\diamond + B_2 (\rho_{m,0}^\diamond)^3 + (B_3 + B_4/T_0^\diamond) (\rho_{m,0}^\diamond)^4 + (B_5 + B_6/T_0^\diamond) (\rho_{m,0}^\diamond)^5 \quad (2.5.21)$$

auszuwerten. Dabei ist $T_0^\diamond = T_0/T_{cr,C_3H_8}$ und $\rho_{m,0}^\diamond = \rho_{m,0}/\rho_{m,cr,C_3H_8}$. Die Funktionsparameter A_1 , A_2 und A_3 hängen selbst von T_0 ab:

$$A_1 = \exp(C_1 + C_2/T_0), \quad (2.5.22)$$

$$A_2 = C_3 + C_4/T_0^{1,5}, \quad (2.5.23)$$

$$A_3 = C_5 + C_6/T_0 + C_7/T_0^2. \quad (2.5.24)$$

Die Konstanten B_i und C_i sind in Tab. 2.1 gegeben. Im letzten Schritt ergeben sich die

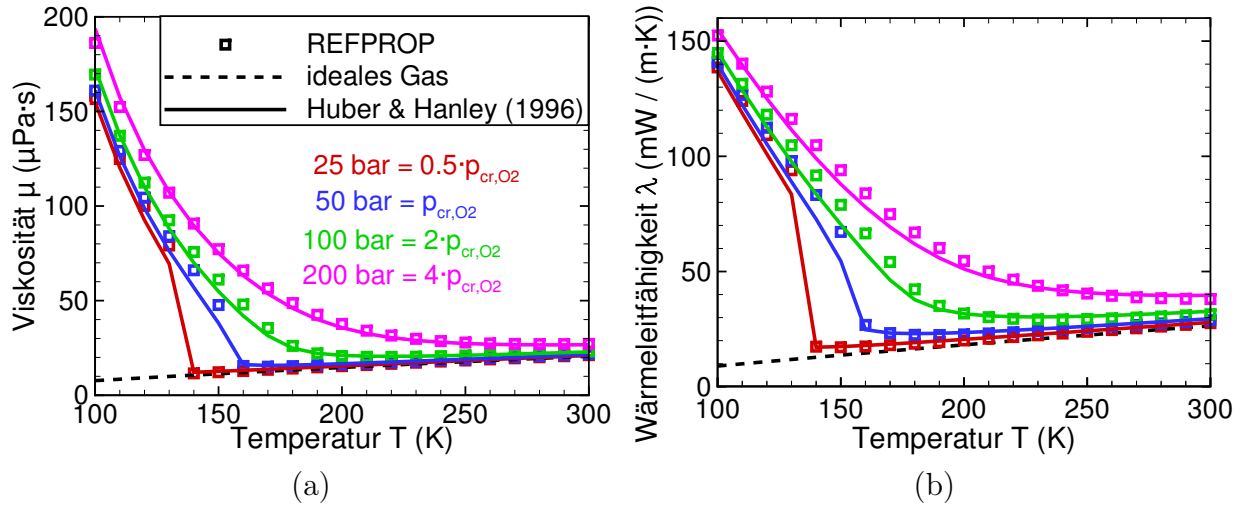


Abbildung 2.15: Vergleich der mit dem Huber-und-Hanley-Modell (Huber und Hanley (1996) [82]) berechneten Viskositäten (a) und Wärmeleitfähigkeiten (b) von O₂ mit Korrelationen aus REFPROP.

Viskosität und Wärmeleitfähigkeit für reale Fluide zu

$$\mu = \mu^{\text{iG}} + F_{\eta} \Delta\mu \cdot 10^{-6}, \quad (2.5.25)$$

$$\lambda = \lambda^{\text{iG}} + F_{\lambda} \chi_{\lambda} \Delta\lambda \cdot 10^{-3}. \quad (2.5.26)$$

Die Faktoren 10^{-6} und 10^{-3} werden benötigt, da $\Delta\mu$ und $\Delta\lambda$ in den Einheiten $\mu\text{Pa}\cdot\text{s}$ und $\text{mW}/(\text{m}\cdot\text{K})$ gegeben sind.

Ein Vergleich berechneter Viskositäten (Abb. 2.15(a)) und Wärmeleitfähigkeiten (Abb. 2.15(b)) von O₂ mit Korrelationen aus REFPROP zeigt, dass das Modell von Huber und Hanley (1996) [82] die Abweichungen zum Idealgaszustand sehr gut abbilden kann. Die Genauigkeit der Modelle von Ely und Hanley (1981, 1983) [44, 45] sowie Chung et al. [31] ist für O₂ in etwa vergleichbar (hier nicht dargestellt). Quantitativ ergeben sich zwischen den Modellen und REFPROP Korrelationen vor allem um den kritischen Punkt größere Abweichungen. In der Nähe des kritischen Punktes tritt in der Realität eine zusätzliche Überhöhung der Wärmeleitfähigkeit (und deutlich schwächer auch der Viskosität) auf, was in der Literatur als „Critical Enhancement“ bezeichnet wird (Lee (1990) [108]). Diese klingt jedoch mit zunehmender Entfernung vom kritischen Punkt rasch ab und wird in dieser Arbeit nicht berücksichtigt³⁰. Die Abweichungen resultieren allgemein auch aus Unsicherheiten in der Dichteberechnung mittels der verwendeten SRK Zustandsgleichung. Für polare Fluide wie H₂O können die Ungenauigkeiten wesentlich größer sein als für O₂. Für Mischungen ist analog zu den Zustandsgleichungen mit weiteren Ungenauigkeiten gegenüber der Betrachtung von Reinstoffen zu rechnen. Da Mischungen in heutigen Raketenbrennkammern mit H₂-O₂ Verbrennung im operativen Betrieb jedoch vorwiegend bei hohen Temperaturen und damit bei näherungs-

³⁰ Für Mischungen ist der Einfluss des Critical Enhancements zudem meist deutlich geringer als für Reinstoffe (Friend und Roder (1985) [53]).

weise Idealgasbedingungen vorliegen, spielt dieser Effekt vermutlich nur eine untergeordnete Rolle.

Die binären Diffusionskoeffizienten einer realen Mischung wurden in dieser Arbeit mit einem leicht modifizierten Modell von Riazi und Whitson (1993) [183] berechnet. Dieses ist im Gegensatz zum Modell von Takahashi (1974) [212] kontinuierlich im gesamten thermodynamischen Bereich anwendbar. Aufbauend auf den Diffusionskoeffizienten eines idealen Gemisches ergeben sich die entsprechenden Werte für eine reale Mischung zu

$$\frac{(\rho_m D_{\alpha\beta})}{(\rho_m D_{\alpha\beta})^{\text{ig}}} = d_{\alpha\beta}^{\text{R-W}} \Leftrightarrow D_{\alpha\beta} = D_{\beta\alpha} = (p D_{\alpha\beta})^{\text{ig}} \frac{v_m}{R_u T} d_{\alpha\beta}^{\text{R-W}} \quad (2.5.27)$$

$$\text{mit } d_{\alpha\beta}^{\text{R-W}} = a \left(\frac{\mu}{\mu^{\text{ig}}} \right)^{b+c p/p_{\text{cr}}},$$

$$b = -0,27 - 0,38 \varpi,$$

$$\text{und } c = -0,05 + 0,10 \varpi.$$

Hierbei sind p_{cr} und ϖ die mit dem Molenbruch gewichteten, arithmetischen Mittelwerte dieser Größen beider Komponenten α und β eines binären Gemisches. Der Ausdruck $(p D_{\alpha\beta})^{\text{ig}}$ kann aus Glg. (2.5.7) gewonnen werden. Der Faktor a ist im Originalmodell auf den Wert 1,07 festgelegt. Damit das Modell jedoch unter Idealgasbedingungen gegen das korrekte Limit eines idealen Gemisches geht, wurde dieser hier modifiziert und zu 1,00 gesetzt. Da die Fehler im Hochdruckbereich ohnehin oft recht groß sind, spielt diese Änderung zum Originalmodell in Höhe von 7 % nur eine geringe Rolle.

Gleichung (2.5.27) ist streng genommen nur für binäre Mischungen gültig. Um den Rechenaufwand gering zu halten, wurden im CFD-Code für alle Speziespaare (α, β) die Größen μ , μ^{ig} , p_{cr} und ϖ der gesamten Mischung verwendet bzw. für die beiden letzten Größen deren mit dem Molenbruch gewichtetes, arithmetisches Mittel der Reinstoffe. In Raketenbrennkammersimulationen mit H_2 - O_2 Verbrennung treten überwiegend Bereiche auf, in denen näherungsweise binäre Mischungen vorliegen (H_2 mit H_2O bzw. O_2 mit H_2O sowie möglicherweise H_2 mit O_2) oder Realgaseffekte aufgrund der sehr hohen Temperaturen vernachlässigt werden können. Aus diesem Grund sollte diese Näherung keinen allzu großen Einfluss entfalten. Da das Modell von Riazi und Whitson (1993) [183] von μ , μ^{ig} und v_m abhängt, wird die Genauigkeit des Modells im CFD-Code auch von den vorangeschalteten Modellen für die Viskositätsberechnung sowie der verwendeten Zustandsgleichung beeinflusst.

Abbildungen 2.16(a) und 2.16(b) zeigen einen Vergleich experimentell ermittelter Diffusionskoeffizienten einer CO_2 - C_2H_4 Mischung sowie einer H_2O - CO_2 Mischung mit berechneten Werten nach den Modellen von Fuller et al. (1966) [55] (für ideale Gase, siehe Abschnitt 2.5.2), Riazi und Whitson (1993) [183] sowie Takahashi (1974) [212]. Während das Modell von Fuller et al. (1966) [55] bei niedrigen Drücken noch sehr gute Ergebnisse liefert, werden die Diffusionskoeffizienten mit ansteigenden Drücken zunehmend überschätzt. Die Modelle von Riazi

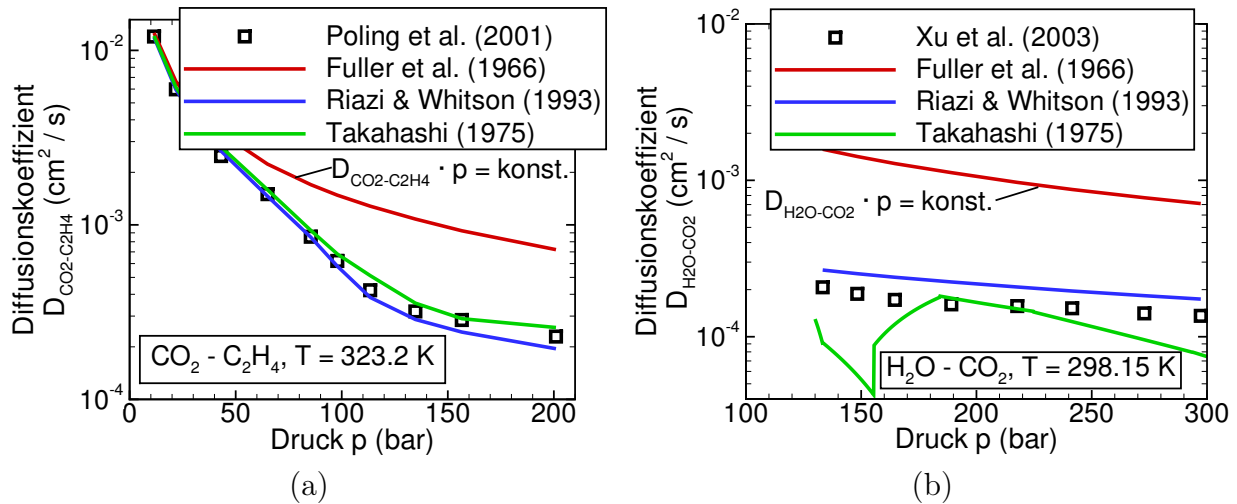


Abbildung 2.16: Vergleich berechneter binärer Diffusionskoeffizienten einer $\text{CO}_2 - \text{C}_2\text{H}_4$ Mischung (a) und einer $\text{H}_2\text{O} - \text{CO}_2$ Mischung (b) nach den Modellen von Fuller et al. (1966) [55] (für ideale Gase), Riazi und Whitson (1993) [183] sowie Takahashi (1974) [212] mit experimentellen Daten aus Poling (2001) [176] bzw. Xu et al. (2003) [246].

und Whitson (1993) [183] sowie Takahashi (1974) [212] liefern für die $\text{CO}_2 - \text{C}_2\text{H}_4$ Mischung beide sehr ähnliche und gute Resultate. Im Falle der $\text{H}_2\text{O} - \text{CO}_2$ Mischung wird jedoch deutlich, dass wie zuvor erwähnt das Modell von Takahashi (1974) [212] unphysikalische Werte liefern kann. Das Modell von Riazi und Whitson (1993) [183] hingegen zeigt auch hier eine gute Übereinstimmung mit den experimentellen Messwerten.

3 Gleichungssatz turbulenter, reaktiver Strömungen

In diesem Kapitel werden die zugrundeliegenden Gleichungen und Modelle für die Simulation turbulenter Strömungen ohne und mit Verbrennung beschrieben, welche im verwendeten CFD-Code TASCOM3D (Simsont und Gerlinger (2016) [198]) implementiert sind und verwendet wurden.

3.1 Erhaltungs- und Transportgleichungen

Für die Modellierung kompressibler, turbulenter und reaktiver Strömungen werden in dieser Arbeit die gemittelten³¹ oder alternativ die räumlich gefilterten³², erweiterten Navier-Stokes Gleichungen verwendet. Aufgrund der starken Dichtevariationen und teils sehr hohen Strömungsgeschwindigkeiten in den durchgeführten Simulationen kommt deren kompressible Form zum Einsatz. Der Erhalt von Masse, Impuls und Energie wird durch die Kontinuitäts-, Impulserhaltungs- und Energieerhaltungsgleichung beschrieben. Die in dieser Arbeit verwendete Turbulenzmodellierung basiert auf Zweigleichungsturbulenzmodellen (Davidson (2011) [39]), so dass zwei weitere Transportgleichungen für zwei Turbulenzvariablen gelöst werden müssen. Die beiden Turbulenzvariablen stellen entsprechend kombiniert ein Maß für die charakteristischen turbulenten Längen- und Zeitskalen dar. Für die Modellierung des Speziestransports werden weitere $N_{\text{sp}} - 1$ Komponentenerhaltungsgleichungen gelöst, wobei N_{sp} die Anzahl der berücksichtigten Spezies ist. Im Falle reaktiver Strömungen wird ein Finite-Raten Chemie (FRC) Ansatz für die Verbrennungsmodellierung gewählt (Gerlinger (2005) [58]). Hierfür wird ein zusätzlicher chemischer Quellterm in die Komponentengleichungen eingefügt³³.

Die Navier-Stokes Gleichungen sind ein stark gekoppeltes System von Differentialgleichungen, welches sich kompakt in Vektorschreibweise und unter Zuhilfenahme der Einstein'schen Summenkonvention³⁴ darstellen lässt. In differentieller Form ergibt sich (Hirsch (2007) [79], Masatsuka (2013) [128])

³¹ Zeitliches Mittel für stationäre RANS bzw. Ensemblemittel für instationäre URANS Simulationen.

³² Für LES bzw. hybride URANS / LES Verfahren (wie z. B. DDES) im LES-Modus.

³³ Die Spezieserhaltungsgleichungen werden somit zu reinen Transportgleichungen für die jeweilige Spezies.

³⁴ Wenn nicht anders angegeben, wird über doppelte Indizes in Produkttermen aufsummiert.

$$\frac{\partial (y^\delta \mathbf{Q}_c)}{\partial t} + \frac{\partial (y^\delta \mathbf{F}_\ell)}{\partial x_\ell} = \mathbf{S}. \quad (3.1.1)$$

Dabei ist \mathbf{Q}_c der konservative Variablenvektor, \mathbf{F}_ℓ der Flussvektor in ℓ -Richtung, \mathbf{S} der Quelltermvektor, t die Zeit und x_ℓ die Raumkoordinate in ℓ -Richtung. Für den zweidimensionalen, rotationssymmetrischen Fall repräsentiert $y = x_2$ die Koordinate senkrecht zur Rotationsachse $x = x_1$ und es gilt $\delta = 1$ (Meng und Yang (2003) [139], Masatsuka (2013) [128], Shuen et al. (1993) [195]). Zusätzlich enthält der Quellterm \mathbf{S} weitere Einträge aufgrund der Koordinatentransformation in Zylinderkoordinaten. Für alle anderen Fälle gilt $\delta = 0$. Der Index ℓ durchläuft alle Raumrichtungen von 1 bis $N_{\text{Dim}} = 1, 2, 3$ für 1D, 2D und 3D Simulationen. Der Wertebereich für die Indizes $\ell, m, n = 1, \dots, N_{\text{Dim}}$ und $\alpha, \beta = 1, \dots, N_{\text{sp}} - 1$ wird in den nachfolgenden Gleichungen nicht weiter explizit angegeben.

Für die in dieser Arbeit verwendete Finite-Volumen Diskretisierungsmethode (Versteeg und Malalasekera (2007) [230]) wird die mathematisch äquivalente Integralform verwendet (Hirsch (2007) [79], Masatsuka (2013) [128]):

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{\Omega} y^\delta \mathbf{Q}_c \, dV' + \oint_S y^\delta \mathbf{F}_\ell \, dS'_\ell = \int_{\Omega} \mathbf{S} \, dV'. \quad (3.1.2)$$

Dabei ist Ω das integrierte Volumen und S dessen Oberfläche. Diese Form ist allgemeiner und lässt auch Unstetigkeiten in der Lösung zu, wie sie an Phasengrenzen (z. B. bei lokaler Kondensation) oder in Überschallströmungen an Verdichtungsstößen (z. B. bei Strömungsablösung in unterexpandierten Düsen von Raketentriebwerken) vorkommen. Für eine übersichtlichere Darstellung und bessere Lesbarkeit wird nachfolgend jedoch auch teilweise auf die differentielle Form zurückgegriffen.

Der in den Gleichungen (3.1.1) und (3.1.2) verwendete Vektor der konservativen Variablen ergibt sich für die gewählte Turbulenz- und Chemiemodellierung zu

$$\mathbf{Q}_c = \bar{\rho} \left[1, \{\tilde{u}_\ell\}, \tilde{e}_{\text{tot}}, K, \omega, \{\tilde{Y}_\alpha\} \right]^T. \quad (3.1.3)$$

Variablen in geschweiften Klammern stellen Reihenvektoren mit entsprechender Anzahl an Einträgen dar. Die im Vektor \mathbf{Q}_c enthaltenen Variablen sind die Dichte ρ , die Geschwindigkeitskomponenten in ℓ -Richtung u_ℓ , die massenspezifische Totalenergie e_{tot} sowie der Vektor der Speziesmassenbrüche $\{Y_\alpha\}$. Ein $\tilde{}$ kennzeichnet gemittelte bzw. gefilterte Variablen unter Verwendung der Reynolds-Zerlegung, Variablen mit \sim stehen analog für Variablen, die sich unter Verwendung der dichte-basierten Favre-Zerlegung ergeben (Hirsch (2007) [79]). \mathbf{Q}_c enthält zudem zwei Turbulenzvariablen. Für die in dieser Arbeit verwendeten Zweigleichungsturbulenzmodelle sind dies stets die turbulente Frequenz ω sowie eine weitere Variable K . Diese repräsentiert entweder die turbulente kinetische Energie k oder deren Wurzel $q = \sqrt{k}$.

Der Quelltermvektor \mathbf{S} besitzt Einträge aufgrund von Gravitation (soweit nicht vernach-

lässigt) in den Impuls- und Energieerhaltungsgleichungen, aufgrund von Turbulenz in den Transportgleichungen für die Turbulenzvariablen und aufgrund von chemischen Reaktionen in den Speziestransportgleichungen. Außerdem ergeben sich wie schon erwähnt weitere Einträge im Falle achsensymmetrischer Rechnungen. Der Quelltermvektor ergibt sich mit dem Beschleunigungvektor durch Gravitation³⁵ $\{g_\ell\} = [-9,81 \text{ m}^2/\text{s}, 0, 0]^T$ zu

$$\mathbf{S} = y^\delta \left[0, \{\bar{\rho}g_\ell\}, \bar{\rho}\tilde{u}_\ell g_\ell, S_K, S_\omega, \{S_{Y_\alpha}\} \right]^T + \delta \left[0, 0, \bar{p} - \frac{4}{3}\mu_{\text{eff}}\frac{\tilde{v}}{y} + \frac{2}{3}\left(\mu_{\text{eff}}\left(\frac{\partial\tilde{u}}{\partial x} + \frac{\partial\tilde{v}}{\partial y}\right) + \bar{\rho}k\right), 0, \dots, 0 \right]^T. \quad (3.1.4)$$

Dabei sind $\tilde{u} = \tilde{u}_1$ und $\tilde{v} = \tilde{u}_2$ die Geschwindigkeitskomponenten in Richtung $x = x_1$ bzw. $y = x_2$ und μ_{eff} ist die effektive Viskosität. S_K und S_ω sind Quellterme in den Turbulenzgleichungen aufgrund von Produktion, Dissipation und Umverteilung von Turbulenz.

Der Flussvektor in die ℓ -Raumrichtung

$$\mathbf{F}_\ell = (\mathbf{F}_{k,\ell} - \mathbf{F}_{d,\ell}), \quad (3.1.5)$$

lässt sich in die Anteile aus reibungsfreiem (konvektivem und akustischem) Fluss $\mathbf{F}_{k,\ell}$

$$\mathbf{F}_{k,\ell} = \tilde{u}_\ell \mathbf{Q}_c + [0, \{\bar{p} \delta_{\ell m}\}, \tilde{u}_\ell \bar{p}, 0, \dots, 0]^T \quad (3.1.6)$$

und reibungsbehaftetem (diffusivem) Fluss $\mathbf{F}_{d,\ell}$

$$\mathbf{F}_{d,\ell} = \left[0, \{\tau_{\ell m}\}, \tilde{u}_\ell \tau_{\ell m} + \mu_{\text{eff}} \frac{\partial k}{\partial x_\ell} - \phi_\ell, \mu_{\text{eff},K} \frac{\partial K}{\partial x_\ell}, \mu_{\text{eff},\omega} \frac{\partial \omega}{\partial x_\ell}, \{j_\alpha\} \right]^T \quad (3.1.7)$$

aufspalten. Dabei ist $\delta_{\ell m}$ das Kronecker-Delta. $\mu_{\text{eff},K}$ und $\mu_{\text{eff},\omega}$ sind die effektiven Diffusionskoeffizienten in den Turbulenzgleichungen.

Die diffusiven Flüsse enthalten weitere Terme, welche modelliert werden müssen. Die Komponenten des effektiven Spannungstensors $\tau_{\ell m}$ werden mit Hilfe der Boussinesq- und Stokes-Hypothese sowie der Annahme eines Newton'schen Fluides auf folgende Weise modelliert (Hirsch (2007) [79], Masatsuka (2013) [128], Versteeg und Malalasekera (2007) [230]):

$$\tau_{\ell m} = \mu_{\text{eff}} \left(\frac{\partial \tilde{u}_\ell}{\partial x_m} + \frac{\partial \tilde{u}_m}{\partial x_\ell} - \frac{2}{3} \frac{\partial \tilde{u}_n}{\partial x_n} \delta_{\ell m} \right) - \frac{2}{3} \bar{\rho} k \delta_{\ell m}. \quad (3.1.8)$$

Der modellierte Wärmestrom ϕ_ℓ setzt sich aus einem Anteil aus der Fourier'schen Wärmeleitung und einem Anteil aufgrund von Enthalpietransport durch Speziesdiffusion zusammen:

³⁵ Die x_1 -Achse des Koordinatensystems wird senkrecht zur Gravitationskraft angenommen.

$$\phi_\ell = -\lambda_{\text{eff}} \frac{\partial \tilde{T}}{\partial x_\ell} + \bar{\rho} \sum_{\alpha=1}^{N_{\text{sp}}} \tilde{h}_\alpha \tilde{Y}_\alpha \Delta \tilde{u}_{\ell,\alpha}. \quad (3.1.9)$$

Hierbei ist λ_{eff} die effektive Wärmeleitfähigkeit. Die Diffusionsgeschwindigkeiten $\Delta \tilde{u}_{\ell,\alpha}$ werden über das Fick'sche Gesetz modelliert (CHEMKIN[®] [23]):

$$\Delta \tilde{u}_{\ell,\alpha}^{\text{Fick}} = -D_{\alpha,\text{eff}} \frac{1}{\tilde{Y}_\alpha} \frac{\partial \tilde{Y}_\alpha}{\partial x_\ell}. \quad (3.1.10)$$

Dabei ist $D_{\alpha,\text{eff}}$ ein effektiver Diffusionskoeffizient der Spezies α in die Mischung, welcher sich aus einem laminaren D_α und einem turbulenten D_t Anteil zusammensetzt. Ersterer wird wie folgt aus den Molanteilen und den binären Massendiffusionskoeffizienten gewonnen (CHEMKIN[®] [23]):

$$D_\alpha = \frac{1 - \tilde{X}_\alpha}{\sum_{\substack{\beta=1 \\ \beta \neq \alpha}}^{N_{\text{sp}}} \frac{\tilde{X}_\beta}{D_{\alpha\beta}}} \cong \frac{\sum_{\substack{\beta=1 \\ \beta \neq \alpha}}^{N_{\text{sp}}} \tilde{X}_\beta^*}{\sum_{\substack{\beta=1 \\ \beta \neq \alpha}}^{N_{\text{sp}}} \frac{\tilde{X}_\beta^*}{D_{\alpha\beta}}}. \quad (3.1.11)$$

Um eine mathematisch wohl definierte Gleichung für den Grenzfall eines Reinstoffes zu erhalten, ist die Formulierung auf der rechten Seite in Glg. (3.1.11) mit $\tilde{X}_\beta^* = \max(\tilde{X}_\beta, 10^{-12})$ zu verwenden (CHEMKIN[®] [23]).

Da die Verwendung eines approximierten Diffusionskoeffizienten D_α in der Regel nicht gewährleistet, dass sich die Summe der Diffusionsströme j_α mit

$$j_\alpha = -\bar{\rho} \tilde{Y}_\alpha \Delta \tilde{u}_{\ell,\alpha} \quad (3.1.12)$$

zu Null ergibt, muss eine Korrektordiffusionsgeschwindigkeit (CHEMKIN[®] [23])

$$\Delta \tilde{u}_\ell^{\text{kor}} = - \sum_{\beta=1}^{N_{\text{sp}}} \tilde{Y}_\beta \Delta \tilde{u}_{\ell,\beta}^{\text{Fick}} \quad (3.1.13)$$

eingeführt werden. Die korrigierten Diffusionsgeschwindigkeiten aus Glg. (3.1.9)

$$\Delta \tilde{u}_{\ell,\alpha} = \Delta \tilde{u}_{\ell,\alpha}^{\text{Fick}} + \Delta \tilde{u}_\ell^{\text{kor}} \quad (3.1.14)$$

erfüllen dann, wie leicht nachzurechnen ist, die Bedingung

$$\sum_{\alpha=1}^{N_{\text{sp}}} j_\alpha = -\bar{\rho} \sum_{\alpha=1}^{N_{\text{sp}}} \tilde{Y}_\alpha \Delta \tilde{u}_{\ell,\alpha} = 0. \quad (3.1.15)$$

Die effektiven Transportkoeffizienten in Gleichungen (3.1.8) - (3.1.10) setzen sich jeweils zusammen aus ihrem molekularen, physikalischen Anteil sowie ihrem turbulenten Anteil.

Letzterer stammt aus der Modellierung der ungeschlossenen Terme, die bei der Mittelung bzw. bei der räumlichen Filterung entstehen. Mittels eines einfachen Gradienten-Diffusions-Ansatzes in Analogie zu den molekularen Anteilen werden diese Terme geschlossen (Versteeg und Malalasekera (2007) [230]):

$$\mu_{\text{eff}} = \mu + \mu_t, \quad (3.1.16)$$

$$\lambda_{\text{eff}} = \lambda + \lambda_t = \lambda + \frac{\mu_t c_p}{\text{Pr}_t}, \quad (3.1.17)$$

$$D_{\alpha,\text{eff}} = D_\alpha + D_t = D_\alpha + \frac{\mu_t}{\text{Sc}_t \rho}. \quad (3.1.18)$$

Der Einfluss turbulenter Schwankungen auf die molekularen Transportkoeffizienten wird vernachlässigt ($\mu \approx \bar{\mu}$, $\lambda \approx \bar{\lambda}$ und $D_\alpha \approx \bar{D}_\alpha$). Die turbulente Viskosität wird über das Turbulenzmodell berechnet. Die turbulente Prandtl- und Schmidt-Zahl (Pr_t , Sc_t) werden in der Regel abhängig vom Testfall und meistens gleich groß gewählt. In der Literatur finden sich typische Werte von 0,9 für die Simulation von Grenzschichten, 0,7 für axialsymmetrische Freistrahlen und 0,5 für planare Freistrahlen (Launder (1991) [103]). Tatsächlich können beide Parameter in komplexeren Strömungen jedoch stark variieren und ihr Einfluss auf die Simulationsergebnisse kann so groß sein wie die Wahl des Turbulenzmodells (Ivanova et al. (2012) [87], Keistler (2009) [91], Xiao et al. (2005) [245]).

Bei der Modellierung der diffusiven Prozesse bleiben Thermodiffusion (Soret-Effekt) sowie der komplementäre Dufour-Effekt in dieser Arbeit unberücksichtigt. Oefelein (2002, 2006) [160, 161] zeigt jedoch, dass beide Effekte bei überkritischen Bedingungen nur einen geringen Einfluss auf die Durchmischung und Verbrennung von H_2 und O_2 in Raketenbrennkammern mit koaxialer Einspritzung haben. Ebenso können Einflüsse aus Druckdiffusion und Strahlung in dieser Arbeit vernachlässigt werden.

Um ein geschlossenes Gleichungssystem zu erhalten sind weitere Beziehungen nötig. Der Massenanteil der N_{sp} -ten Spezies ergibt sich aus nachfolgender Bedingung:

$$\sum_{\alpha=1}^{N_{\text{sp}}} \tilde{Y}_\alpha = 1 \quad \Longleftrightarrow \quad \tilde{Y}_{N_{\text{sp}}} = 1 - \sum_{\alpha=1}^{N_{\text{sp}}-1} \tilde{Y}_\alpha. \quad (3.1.19)$$

Zudem gilt für die gemittelte massenspezifische Totalenergie

$$\tilde{e}_{\text{tot}} = \tilde{e} + \frac{1}{2} \tilde{u}_\ell \tilde{u}_\ell + k = \tilde{h} - \frac{\bar{p}}{\bar{\rho}} + \frac{1}{2} \tilde{u}_\ell \tilde{u}_\ell + k. \quad (3.1.20)$$

Die Verknüpfung von Druck, Dichte, Temperatur und Spezieszusammensetzung erfolgt über eine (thermische) Zustandsgleichung in der allgemeinen Form

$$\bar{p} = \bar{p}(\rho, T, \{Y_\alpha\}) \approx \bar{p}(\bar{\rho}, \tilde{T}, \{\tilde{Y}_\alpha\}). \quad (3.1.21)$$

Dabei werden der Einfluss turbulenter Schwankungen der unabhängigen thermodynamischen Variablen ρ , T und Y_α auf p wegen fehlender, zuverlässiger Modelle vernachlässigt (Yang (2004) [248]). Gleiches gilt für die spezifische Energie und Enthalpie: $\tilde{e} = \tilde{e}(\rho, T, \{Y_\alpha\}) \approx \tilde{e}(\bar{\rho}, \bar{T}, \{\tilde{Y}_\alpha\})$ und $\tilde{h} = \tilde{h}(\rho, T, \{Y_\alpha\}) \approx \tilde{h}(\bar{\rho}, \bar{T}, \{\tilde{Y}_\alpha\})$. Zuletzt werden noch die Stoffeigenschaften (μ , λ , und $D_{\alpha\beta}$) aller Spezies sowie Modelle zur Berechnung der Wärmekapazitäten, Enthalpien und Entropien bei Idealgasbedingungen (c_p^{iG} , h^{iG} und s^{iG}) benötigt, worauf in Kapitel 2 bereits ausführlich Bezug genommen wurde. Die Werte bei Realgasbedingungen ergeben sich für letztere aus der Zustandsgleichung in Kombination mit konsistenten und allgemeingültigen thermodynamischen Formeln (siehe ebenso Kapitel 2).

Im weiteren Verlauf der Arbeit werden aus Gründen der Kompaktheit und Übersichtlichkeit die Terme für 2D achsensymmetrische Rechnungen weggelassen ($\delta = 0$). Die Erweiterung auf 2D achsensymmetrische Strömungen ist jedoch leicht durch erneutes Hinzufügen der entsprechenden Terme zu bewerkstelligen.

3.2 Turbulenzmodellierung

Im Zuge dieser Arbeit kommen sowohl RANS bzw. URANS Simulationen als auch ein hybrides URANS / LES Verfahren, DDES genannt (Kindler (2014) [96]) zur Anwendung. Hierfür werden zur Modellierung der Turbulenz die gemittelten oder gefilterten Navier-Stokes Gleichungen gelöst (siehe vorherigen Abschnitt). RANS bzw. URANS Simulationen erfordern einen deutlich geringeren Einsatz an Rechenressourcen als der Einsatz hochwertigerer LES oder gar DNS, bei denen die turbulenten Wirbelstrukturen teilweise oder ganz durch das Rechengitter aufgelöst werden müssen (Hirsch (2007) [79]). Insbesondere die deutlich höheren Anforderungen an die wandparallele Gitterauflösung in der Grenzschicht erhöhen den Rechenaufwand von LES und DNS erheblich.

3.2.1 RANS und URANS

Für die RANS und URANS Simulationen wurden drei in TASCOM3D verfügbare Zweigleichungsturbulenzmodelle eingesetzt:

- q - ω von Coakley (1992) [32],
- k - ω von Wilcox (2008) [242],
- k - ω SST (Shear Stress Transport) von Menter (1993) [141].

Im k - ω und k - ω SST Modell werden zwei zusätzliche Transportgleichungen für die turbulente kinetische Energie k und die turbulente Frequenz $\omega = \epsilon/k$ gelöst, für das q - ω Modell hingegen für $q = \sqrt{k}$ und ω . Hierbei ist ϵ die Dissipationsrate der turbulenten kinetischen Energie, welche ein Maß für den turbulenten Energietransport in der Energiekaskade von den

großen zu den kleinen Wirbeln darstellt. Die detaillierten Transportgleichungen können den Originalreferenzen oder für die Implementierung in TASCOM3D den Arbeiten von Gerlinger (1995) [56], Stoll (2001) [208] sowie Kindler (2014) [96] entnommen werden. Die jeweiligen beiden Turbulenzgrößen werden zur Berechnung der turbulenten Viskosität verwendet, um das gemittelte bzw. gefilterte Gleichungssystem zu schließen:

$$\mu_t = \mu_t(k, \omega) \quad \text{bzw.} \quad \mu_t = \mu_t(q, \omega). \quad (3.2.1)$$

Alle drei verwendeten Turbulenzmodelle sind sogenannte Low-Reynolds Turbulenzmodelle. Die mit diesen Modellen verwendeten Rechengitter zeichnen sich durch eine feine Gitterauflösung entlang von Wänden in lokal zu den Wänden orthonormaler Richtung aus. Die wandnächste Zelle sollte als Richtwert so gewählt werden, dass für deren dimensionslosen Wandabstand $y^+ \leq 1$ erfüllt ist³⁶ (Menter et al. (2003) [140]). Dies wurde auch in dieser Arbeit bei der Gittergenerierung berücksichtigt. Die steilen Gradienten der Strömungsgrößen an den Wänden werden damit durch das Rechengitter aufgelöst und nicht modelliert, so dass sich Rechnungen mit Low-Reynolds Turbulenzmodellen auch zur Simulation komplexer wandnaher Strömungen (z. B. mit Ablösung) eignen³⁷. In den in dieser Arbeit präsentierten Simulationen zeigte sich das q - ω Modell als das numerisch robusteste. Allerdings wurde auch ein stark dämpfender und diffusiver Einfluss auf die Strömung gegenüber den beiden anderen verwendeten Modellen beobachtet. Sowohl das q - ω als auch das k - ω SST Modell eigneten sich in den untersuchten Testfällen eher dazu, ein stationäres Strömungsfeld als Lösung zu erhalten. Simulationen mit dem k - ω Modell zeigten auf identischen Rechengittern tendenziell ein instationäreres Verhalten.

3.2.2 Hybrides URANS / LES Verfahren: DDES

Die DES (Detached-Eddy Simulation) von Spalart et al. (1997) [205] verknüpft die Vorteile von URANS Simulationen und LES. In der wandnahen Grenzschicht werden die Gleichungen im URANS-Modus gelöst, während in der Kernströmung die modellierte turbulente Wirbelviskosität reduziert und somit im LES-Modus gerechnet wird. Der Einsatz von RANS Modellen an Wänden reduziert die erforderliche Gitterauflösung in wandparalleler Richtung deutlich gegenüber einer reinen LES. Zudem sind RANS Turbulenzmodelle oft für eine gute Wiedergabe wandnaher Strömungen kalibriert. In der Kernströmung unterscheidet sich

³⁶ Die wandnächste Zelle befindet sich damit im Low-Reynolds Bereich, also im Bereich sehr niedriger Reynoldszahlen, in dem die Reibungskräfte gegenüber den Trägheitskräften dominieren.

³⁷ Für die Simulation wandnaher Strömungen können auch sogenannte High-Reynolds Turbulenzmodelle wie das k - ϵ Modell herangezogen werden (Davidson (2011) [39]). Diese verwenden eine grobe Wandauflösung ($30 < y^+ < 100$ für die wandnächste Zelle) und sind daher weniger rechenintensiv (Davidson (2011) [39]). Die Verknüpfung zwischen Wand und Kernströmung wird modelliert und erfolgt über sogenannte Wandfunktionen (Davidson (2011) [39]). Da diese auf der Annahme einer vollausgebildeten, turbulenten Grenzschicht basieren, sind High-Reynolds Turbulenzmodelle jedoch in der Regel nicht für die Berechnung wandnaher Strömungen mit Ablösung geeignet.

die DES praktisch nicht von einer reinen LES und die feinskaligen, turbulenten Strukturen werden bei entsprechend feinem Rechengitter größtenteils aufgelöst anstatt modelliert. Die DDES (Delayed DES) von Spalart et al. (2006) [204] ist eine Weiterentwicklung der DES mit einem verbesserten Übergang zwischen beiden Zonen³⁸.

Die DES und die DDES wurden ursprünglich von Spalart et al. (1997) [205] und Spalart et al. (2006) [204] aufbauend auf dem Eingleichungsturbulenzmodell von Spalart und Allmaras (1992) [203] entwickelt, sind jedoch auch auf andere Turbulenzmodelle wie das k - ω Modell von Wilcox (2008) [242] und das k - ω SST Modell von Menter (1993) [141] anwendbar (Travin et al. (2004) [217]). In dieser Arbeit wird die DDES in Kombination mit dem k - ω Modell wie von Kindler (2014) [96] implementiert verwendet. Das Umschalten zwischen URANS- und LES-Modus erfolgt hier durch eine Modifikation der turbulenten RANS-Längenskala $\ell_{k-\omega}$ im Dissipationsterm $D_{k,\text{RANS}}$ der k -Gleichung, welcher Bestandteil des Quellterms S_k ist:

$$D_{k,\text{RANS}} \sim k \omega \sim \frac{k^{3/2}}{\ell_{k-\omega}} \quad \text{mit} \quad \ell_{k-\omega} \sim \frac{k^{1/2}}{\omega}. \quad (3.2.2)$$

Das Längenmaß $\ell_{k-\omega}$ wird nun durch einen neuen Ausdruck

$$\ell_{\text{DDES}} = \ell_{k-\omega} - f_{\text{DDES}} \cdot \max(0, \ell_{k-\omega} - C_{\text{DDES}} \Delta_{\text{DDES}}) \quad (3.2.3)$$

ersetzt. Dabei ist f_{DDES} eine Überblendfunktion, C_{DDES} eine Konstante ähnlich der Smagorinsky-Konstante (Smagorinsky (1963) [199]) und Δ_{DDES} die lokale Filterweite, welche in der Kernströmung etwa der längsten Zellseite entspricht. Die Berechnung der Filterweite und der Überblendfunktion nach Spalart et al. (2006) [204] ermöglicht ein korrektes Umschalten vom URANS-Modus an der Wand mit Längenskala $\ell_{k-\omega}$ hin zum LES-Modus in der Kernströmung mit Längenskala $\ell_{\text{DDES}} = C_{\text{DDES}} \Delta_{\text{DDES}}$. Die turbulente Viskosität wird im LES-Modus deutlich reduziert ($\mu_t \sim \ell_{\text{DDES}}^2 \ll \ell_{k-\omega}^2$). Unter der Annahme, dass lokal ein Gleichgewicht aus Turbulenzproduktion (auf der makroskopischen Ebene der großen Wirbel) und Energiedissipation (auf der mikroskopischen Ebene der kleinsten Wirbel) besteht, geht die DDES im LES-Modus in die Form des Modells von Smagorinsky (1963) [199] über³⁹. Im LES-Modus ist die k -Gleichung zudem fast vollständig von der ω -Gleichung entkoppelt. Eine Übersicht zum in dieser Arbeit verwendeten DES Ansatz findet sich in Kindler (2014) [96].

³⁸ Die DES neigt zu einem zu frühen Umschalten in den LES-Modus in der Grenzschicht (Spalart et al. (2006) [204]).

³⁹ Exakt ist dies nur für inkompressible Strömungen der Fall, da das Smagorinsky-Modell auf Basis inkompressibler Strömungen entwickelt wurde. Die Anteile aufgrund von Kompressibilität und der modellierten turbulenten kinetischen Energie im Spannungstensor sind jedoch in vielen Fällen weitgehend vernachlässigbar.

3.3 Verbrennungsmodellierung

Der Quellterm S_{Y_α} in den Speziestransportgleichungen beschreibt die Umsatzrate der jeweiligen Spezies durch chemische Reaktionen. Dieser Term ist eine stark nichtlineare Funktion der Temperatur und Spezieskonzentrationen. Der bei der Mittelung bzw. Filterung entstehende, gemittelte bzw. gefilterte chemische Quellterm ist nicht mehr eine geschlossene Funktion der gemittelten bzw. gefilterten Temperatur und Spezieskonzentrationen, sondern hängt auch von deren Schwankungsgrößen ab. Mit Hilfe von Ansätzen basierend auf Wahrscheinlichkeitsdichtefunktionen kann der Einfluss turbulenter Schwankungen auf die Reaktionsrate berücksichtigt werden (Gerlinger (2005) [58]). Turbulenz-Chemie-Interaktion bleibt jedoch im Rahmen dieser Arbeit unberücksichtigt. Damit werden die gemittelten Reaktionsraten nur als Funktion der gemittelten, unabhängigen Variablen modelliert, was bei stark turbulenten Flammen zu größeren Fehlern in der Modellierung führen kann:

$$S_{Y_\alpha} = S_{Y_\alpha}(\rho, T, \{Y_\alpha\}) \approx S_{Y_\alpha}(\bar{\rho}, \tilde{T}, \{\tilde{Y}_\alpha\}). \quad (3.3.1)$$

Bei dem in dieser Arbeit verwendeten Finite-Raten Chemie (FRC) Ansatz wird die Verbrennung als System von Elementarreaktionen dargestellt. Dafür werden teils sehr detaillierte Reaktionsmechanismen verwendet, die der Literatur entnommen werden können. Für H_2 - O_2 Verbrennungssimulationen bei hohen Drücken existieren einige gut validierte Reaktionsmechanismen. Die Mechanismen von Ó Conaire et al. (2004) [158], Li et al. (2004) [119] und Burke et al. (2012) [18] sind für den Bereich der Hochdruckverbrennung validiert, wie er in Raketenbrennkammern vorkommt. Alle drei Reaktionsmechanismen basieren auf 19 Reaktionen und acht Spezies (H_2 , O_2 , OH , H , O , HO_2 , H_2O_2 , H_2O), für die jeweils (bis auf die letzte Spezies) eine Transportgleichung gelöst werden muss.

Das System von Elementarreaktionen lässt sich für N_{sp} Spezies und N_r Elementarreaktionen kompakt in folgender Darstellung zusammenfassen:

$$\sum_{\alpha=1}^{N_{sp}} \nu'_{\alpha,r} \tilde{c}_\alpha \xrightleftharpoons[k_{br}]{k_{fr}} \sum_{\alpha=1}^{N_{sp}} \nu''_{\alpha,r} \tilde{c}_\alpha, \quad r = 1, \dots, N_r. \quad (3.3.2)$$

Dabei stehen $\nu'_{\alpha,r}$ und $\nu''_{\alpha,r}$ für die Stöchiometrikoeffizienten der Edukte und Produkte der Komponente α in der Elementarreaktion r (Gerlinger (2005) [58]). Die Konzentration einer Spezies α ist

$$\tilde{c}_\alpha = \frac{\bar{\rho} \tilde{Y}_\alpha}{M_{w_\alpha}}, \quad (3.3.3)$$

wobei sich die Konzentration der letzten Spezies N_{sp} mit Hilfe der Kontinuitätsgleichung aus

$$\tilde{c}_{N_{sp}} = \frac{\bar{\rho}}{M_{w_{N_{sp}}}} \left(1 - \sum_{\alpha=1}^{N_{sp}-1} \tilde{Y}_\alpha \right) \quad (3.3.4)$$

ergibt. Die gemittelte Geschwindigkeitskonstante \bar{k}_{f_r} (f = forward) der Hinreaktion r wird über einen Arrhenius-Ansatz (unter Vernachlässigung turbulenter Schwankungen) berechnet:

$$\bar{k}_{f_r} \approx A_r \tilde{T}^{n_r} \exp \left(\frac{E_{A_r}}{R_u \tilde{T}} \right). \quad (3.3.5)$$

Dabei werden die Arrheniuskonstante A_r , der Temperaturkoeffizient n_r sowie die Aktivierungsenergie E_{A_r} aus dem verwendeten Reaktionsmechanismus entnommen. Die gemittelte Geschwindigkeitskonstante \bar{k}_{b_r} (b = backward) der Rückreaktion wird über die Gleichgewichtskonstante \bar{K}_{c_r} mit

$$\bar{k}_{b_r} = \frac{\bar{k}_{f_r}}{\bar{K}_{c_r}} \quad (3.3.6)$$

ermittelt. Die temperaturabhängige, auf Konzentrationen bezogene Gleichgewichtskonstante ergibt sich wiederum zu

$$\bar{K}_{c_r} = \bar{K}_{f_r} \left(\frac{p_0}{R_u \tilde{T}} \right)^{\sum_{\alpha=1}^{N_{sp}} (\nu''_{\alpha,r} - \nu'_{\alpha,r})}. \quad (3.3.7)$$

Der Referenzdruck p_0 ist 1,01325 bar. Die auf Fugazitäten (siehe Abschnitt 2.4.2.4) basierte Gleichgewichtskonstante K_{f_r} ist dabei für reale Fluide

$$\bar{K}_{f_r} = \exp \left[-\frac{1}{R_u \tilde{T}} \sum_{\alpha=1}^{N_{sp}} (\nu''_{\alpha,r} - \nu'_{\alpha,r}) \tilde{\mu}_{\alpha} \right]. \quad (3.3.8)$$

Für ideale Gase entspricht K_{f_r} der auf Partialdrücken basierten Gleichgewichtskonstante K_{p_r} und das chemische Potential $\tilde{\mu}_{\alpha} = \tilde{g}_{\alpha} = \tilde{h}_{\alpha} - \tilde{T} \tilde{s}_{\alpha}$ der molaren Gibb-Energie $\tilde{\mu}_{\alpha} \stackrel{\text{iG}}{=} \tilde{g}_{m,\alpha}^{\text{iG}} = \tilde{h}_{m,\alpha}^{\text{iG}} - \tilde{T} \tilde{s}_{m,\alpha}^{\text{iG}}$. Die partiellen molaren Enthalpien und Entropien gehen bei Idealgasbedingungen in die molaren Speziesenthalpien und -entropien über. Da die H_2 - O_2 Verbrennung in Raketenbrennkammern erst bei hohen Temperaturen einsetzt, bei denen nahezu Idealgasbedingungen vorherrschen, können die gleichen Ausdrücke wie für ideale Gase verwendet werden und es ist keine Code-Modifikation an dieser Stelle sowie in den entsprechenden Ableitungen des chemischen Quellterms nach Druck, Temperatur und Speziesmassenbrüchen nötig, welche im impliziten Lösungsverfahren in den Jakobimatrizen benötigt werden (siehe Kapitel 4).

Der chemische Quellterm ergibt sich schließlich zu

$$S_{Y_{\alpha}} = M_{w_{\alpha}} \sum_{r=1}^{N_r} \left[(\nu''_{\alpha,r} - \nu'_{\alpha,r}) \left(\bar{k}_{f_r} \prod_{\alpha=1}^{N_{sp}} \tilde{c}_{\alpha}^{\nu'_{\alpha,r}} - \bar{k}_{b_r} \prod_{\alpha=1}^{N_{sp}} \tilde{c}_{\alpha}^{\nu''_{\alpha,r}} \right) \tilde{c}_{M,r} \right] \quad (3.3.9)$$

mit der (reaktionsabhängigen) Konzentration der fiktiven, inerten Komponente M

$$\tilde{c}_{M,r} = \begin{cases} 1 & \text{für Zweierstoßreaktionen,} \\ \sum_{\beta=1}^{N_{sp}} \varepsilon_{\beta,r} \tilde{c}_{\beta} & \text{für Dreierstoßreaktionen mit inertem Reaktionspartner.} \end{cases} \quad (3.3.10)$$

Die Dreierstoßeffektivitäten $\varepsilon_{\beta,r}$ können den Reaktionsmechanismen entnommen werden.

4 Numerisches Lösungsverfahren

In diesem Kapitel wird das numerische Verfahren beschrieben, welches zum Lösen der in Kapitel 3 eingeführten, turbulenten Strömungsgleichungen mit Verbrennung eingesetzt wird.

4.1 Präkonditionierung und Zeitintegration

Die Konvergenz eines Lösungsverfahrens zur Zeitintegration des Gleichungssystems (3.1.1) hängt maßgeblich von der Konditionierung des Gleichungssystems selbst ab, also dem Verhältnis der größten und kleinsten Zeitskalen, bei denen die physikalischen Phänomene ablaufen. Die Zeitskalen der chemischen Elementarreaktionen in Verbrennungsprozessen unterscheiden sich beispielhaft um mehrere Größenordnungen (Gerlinger (2005) [58]). Auch die Zeitskalen der Wirbel in einer turbulenten Strömung variieren sehr stark. Dies resultiert in einem sehr steifen Gleichungssystem mit schlechter Konditionszahl. Die Konditionszahl ist definiert als

$$Ko = \frac{\max_i |\lambda_{(i)}|}{\min_i |\lambda_{(i)}|}. \quad (4.1.1)$$

Eine Konditionszahl $Ko \approx 1$ entspricht einem sehr gut konditionierten System, sehr große Konditionszahlen einem sehr schlecht konditionierten System. Die Eigenwerte des Gleichungssystems werden durch $\lambda_{(i)}$ repräsentiert, welche als Geschwindigkeitskalen bzw. inverse Zeitskalen betrachtet werden können. Der betragsmäßig größte Eigenwert begrenzt den maximal wählbaren Zeitschritt der meisten numerischen Verfahren.

Der Einsatz expliziter Zeitintegrationsverfahren würde sehr kleine Zeitschritte erforderlich machen, um ein stabiles Verfahren zu erhalten (Gerlinger (2005) [58], Hirsch (2007) [79]). Aufgrund der damit verbundenen großen Anzahl benötigter Zeitschritte (bei instationären Simulationen) bzw. Iterationen bis zur Konvergenz des Verfahrens (bei stationären Simulationen) sind explizite Verfahren für viele Anwendungen oft ineffizient. Durch die (Punkt-)implizite Behandlung des chemischen und turbulenten Quellterms in Glg. (3.1.1) werden zwar die Werte des betragsmäßig größten Eigenwerts und damit der Konditionszahl nicht verringert, d.h. die hohe Steifigkeit des Gleichungssystems (3.1.1) aufgrund der chemischen und turbulenten Quellterme sowie die damit verbundene langsame Konvergenzrate bleiben also erhalten (Meister (2011) [138]), jedoch können wesentlich größere Zeitschritte gewählt werden, ohne dass das numerische Verfahren instabil wird. Der erhöhte Rechenaufwand pro

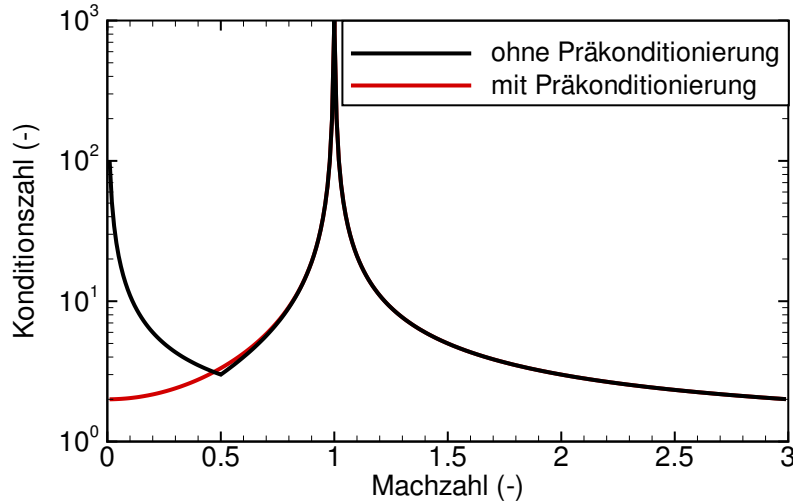


Abbildung 4.1: Konditionszahl der Euler-Gleichungen in Abhängigkeit der Machzahl ohne und mit Präkonditionierung (Stoll (2001) [208]).

Iteration und der für instationäre Simulationen zusätzliche Aufwand aufgrund des nötigen iterativen Vorgehens in impliziten Verfahren kann in vielen Fällen durch die schnellere Konvergenz aufgrund der größer wählbaren Zeitschritte mehr als wett gemacht werden. Der Zeitschritt kann so groß gewählt werden, dass das numerische Verfahren noch stabil ist. Für instationäre Simulationen sollte er jedoch klein genug sein, um die wichtigsten, physikalischen Phänomene mit hinreichender Genauigkeit zeitlich aufzulösen und die numerischen Abbruchfehler aus der zeitlichen Diskretisierung gering zu halten.

Eine weitere Ursache der (lokal) hohen Steifigkeit in den Strömungsgleichungen (3.1.1) sind die (lokal) stark unterschiedlichen Zeitskalen bzw. Ausbreitungsgeschwindigkeiten von konvektiven und akustischen Störungen in der Strömung. Für stationäre, laminare, nichtreakierende Strömungen bei hohen Reynoldszahlen und damit Vernachlässigung der diffusiven Flüsse sowie der Chemiequellterme und Turbulenzgleichungen sind dies die Eigenwerte der Jakobimatrizen der reibungsfreien Flüsse, also $|\mathbf{u}| + a_s$, $|\mathbf{u}| - a_s$ und $|\mathbf{u}|$. Dabei ist $|\mathbf{u}| = \|\tilde{u}_\ell \tilde{u}_\ell\|_2$ der Betrag der Gesamtgeschwindigkeit. Diese Eigenwerte repräsentieren die Ausbreitungsgeschwindigkeiten konvektiver und akustischer Störungen in den Euler-Gleichungen entlang sogenannter Charakteristiken (Hirsch (2007) [79]). Die sich so ergebende Konditionszahl (ohne Präkonditionierung) ist in Abb. 4.1 in Abhängigkeit der Machzahl $Ma = |\mathbf{u}| / a_s$ aufgetragen (Stoll (2001) [208]).

Für sehr kleine Machzahlen ($Ma \rightarrow 0$) und im sonischen Bereich ($Ma \approx 1$) ergibt sich das Problem, dass die Konditionszahl singular wird. Dies führt für Strömungen in diesen Bereichen (lokal) zu einem sehr schlechten Konvergenzverhalten. Bei verschwindender Machzahl kommt erschwerend hinzu, dass die Dichte im Gegensatz zum Druck nur noch sehr schwach an die Geschwindigkeit der Strömung gekoppelt ist: $|d\rho/\rho| = Ma^2 |d\mathbf{u}/\mathbf{u}|$ (VDI (2005) [229]). Dies resultiert in großen numerischen Fehlern durch die endliche Stellenanzahl in der Gleitkommaarithmetik (Lee (2005, 2007) [109, 110]). Eine implizite Behandlung der konvektiven

Terme verbessert zwar die Stabilität des Verfahrens und erlaubt größere Zeitschritte, bei niedrigen und sonischen Machzahlen wird eine gute Konvergenz jedoch weiterhin durch die schlechte Konditionszahl verhindert.

Für (lokal) sonische Strömungsbereiche lässt sich dieses Problem nicht allgemein lösen (Lee (1998) [106], Lee (2012) [111]). Die Konvergenz in Bereichen niedriger Machzahlen kann aber durch etablierte Techniken verbessert werden. Ein Ausweg sind Druck-basierte Löser (Versteeg und Malalasekera (2007) [230]), welche in speziellen Algorithmen zuerst den an die Geschwindigkeit gekoppelten Druck berechnen und im Anschluss die Dichte aus der Beziehung $\rho = \rho(p, T, \{Y_\alpha\})$ bestimmen. Diese Löser finden vorwiegend für inkompressible Strömungen⁴⁰ Anwendung, auch wenn Erweiterungen auf kompressible Strömungen für den gesamten Machzahlbereich existieren (Ferziger und Perić (2002) [50]). Alternativ können Dichte-basierte Löser⁴¹ durch eine Präkonditionierung erweitert werden (Tukel (1992, 1999) [218, 219]), um auch Strömungen mit (lokal) sehr niedrigen Machzahlen berechnen zu können. Dies hat die Vorteile, dass einerseits der gesamte Machzahlbereich abgedeckt wird und andererseits weiterhin die Kontinuitätsgleichung gelöst wird und damit die Massenerhaltung gewährleistet bleibt.

Die Idee der Präkonditionierung besteht darin, ein modifiziertes Gleichungssystem zu lösen, welches bessere Konvergenzeigenschaften besitzt ($Ko = \mathcal{O}(1)$ für $Ma \rightarrow 0$), dessen Lösung im auskonvergierten Zustand jedoch in die des ursprünglichen Gleichungssystems übergeht. Die Eigenwerte des reibungsfreien Systems werden dazu auf die Größenordnung $\mathcal{O}(|\mathbf{u}|)$ skaliert. Für Bereiche niedriger Reynoldszahlen sowie für instationäre, reagierende und turbulente Strömungen ergeben sich lokal Änderungen der Eigenwerte. Dies kann bei der Präkonditionierung berücksichtigt werden, um eine weitere Verbesserung der Konvergenz zu erzielen (Choi und Merkle (1993) [28], Gerlinger (2005) [58], Lee (1998) [107], Tukel und Vatsa (2010) [220], Venkateswaran und Merkle (1995) [228], Vigneron et al. (2006, 2008) [231, 232]), kommt in dieser Arbeit jedoch nicht zur Anwendung. Neben den Eigenwerten kann auch die Orientierung der Eigenvektoren zueinander einen entscheidenden Einfluss auf die Konvergenz und Robustheit des Verfahrens nehmen (deMedeiros und de B. Alves (2012) [40], Darmofal (1996) [38]). An Staupunkten und zu Beginn von Simulationen können (nahe) parallele Eigenvektoren die Stabilität des Verfahrens stark beeinträchtigen. Dies soll an dieser Stelle jedoch nicht weiter vertieft werden.

4.1.1 Präkonditionierung für stationäre Simulationen

Für stationäre Strömungen verschwindet der Zeitableitungsterm in Glg. (3.1.1). Dies hat zur Folge, dass das verbliebene Gleichungssystem unter Betrachtung einer reibungsfreien, inerten

⁴⁰ An dieser Stelle soll darauf aufmerksam gemacht werden, dass der Begriff einer „inkompressiblen Strömung“ von dem eines „inkompressiblen Fluids“ mit $\rho \approx \text{konst.}$ zu unterscheiden ist.

⁴¹ Hier wird ohne Präkonditionierung zuerst die Dichte und anschließend der Druck aus $p = p(\rho, T, \{Y_\alpha\})$ berechnet.

Strömung je nach lokalen Strömungsbedingungen elliptisch, parabolisch oder hyperbolisch im Raum ist (Hirsch (2007) [79]). Dadurch wird ein effizientes Lösen der Gleichungen in konvektionsdominierten Bereichen der Strömung verhindert, da numerische Lösungsverfahren in der Regel nicht für alle drei Bereiche (effizient) anwendbar sind. Um dieses Problem zu umgehen, wird stattdessen auch für stationäre Strömungen oft ein Zeitintegrationsverfahren angewandt (Hirsch (2007) [79]). Dafür wird wieder ein Zeitableitungsterm eingeführt bzw. die Zeit t in Glg. (3.1.1) wird durch eine nichtphysikalische Pseudo-Zeit τ ersetzt (Blazek (2001) [13]):

$$\frac{\partial \mathbf{Q}_c}{\partial \tau} = -\frac{\partial \mathbf{F}_\ell}{\partial x_\ell} + \mathbf{S}. \quad (4.1.2)$$

Im Falle einer konvergierten stationären Lösung verschwindet der künstliche Zeitableitungsterm und man erhält das ursprüngliche Gleichungssystem. Der Vorteil liegt nun darin, dass (für konvektionsdominierte Bereiche der Strömung) über den gesamten Machzahlbereich ein hyperbolisches Gleichungssystem in Raum und Pseudozeit vorliegt (Hirsch (2007) [79]), für dessen Lösung effiziente Algorithmen eingesetzt werden können. Da bei der Zeitintegration für stationäre Lösungen die Genauigkeit in der Pseudo-Zeit keine Rolle spielt, empfiehlt sich die Diskretisierung des Zeitableitungsterms mit einem impliziten Euler-Verfahren, da dieses eine sehr große Stabilität aufweist. Zudem können alle zur Verfügung stehenden Mittel zur Konvergenzbeschleunigung wie lokal unterschiedliche Zeitschritte, Residuenglättung, Mehrgittertechniken oder Präkonditionierung eingesetzt werden (Gerlinger (2005) [58], Blazek (2001) [13]).

Für die Präkonditionierung werden alle „physikalischen“ Terme aus Glg. (4.1.2) mit einer Präkonditionierungsmatrix \mathbb{P} multipliziert:

$$\frac{\partial \mathbf{Q}_c}{\partial \tau} = \mathbb{P} \left(-\frac{\partial \mathbf{F}_\ell}{\partial x_\ell} + \mathbf{S} \right) \quad (4.1.3)$$

$$\Leftrightarrow \mathbb{P}^{-1} \frac{\partial \mathbf{Q}_c}{\partial \tau} = -\frac{\partial \mathbf{F}_\ell}{\partial x_\ell} + \mathbf{S}. \quad (4.1.4)$$

Die alternative Schreibweise in Glg. (4.1.4) eignet sich besser für implizite Verfahren. Im auskonvergierten Zustand hat der Präkonditionierer \mathbb{P} keinen Einfluss auf die Lösung, da der künstliche Zeitableitungsterm in der Pseudo-Zeit verschwindet.

Die Grundidee der Präkonditionierung ist die Modifikation der Eigenwerte auf möglichst gleiche Größe, so dass die Konditionszahl des Gleichungssystems verbessert wird. Dabei besteht eine große Freiheit bei der Wahl des Präkonditionierers. Dessen Form hängt unter anderem von der Problemstellung, dem verwendeten Variablensatz und dem eingesetzten numerischen Verfahren ab (Lee (1996) [105], Turkel (1992, 1999) [218, 219]). In der Literatur finden sich zahlreiche Beispiele für Präkonditionierer zur Lösung der Euler- und Navier-Stokes-Gleichungen. In TASCOM3D (Stoll (2001) [208], Simson und Gerlinger (2016) [198]) wird eine Präkonditionierungsmatrix nach Weiss und Smith (1995) [239] zur Skalierung der

Eigenwerte einer reibungsfreien Strömung verwendet. Abhängig vom verwendeten numerischen Verfahren sind weitere Modifikationen im CFD-Code erforderlich, z.B. bei Einsatz einer zentralen räumlichen Diskretisierung mit künstlicher numerischer Dämpfung oder im hier verwendeten impliziten LU-SGS Algorithmus zur Lösung des Gleichungssystems (3.1.2) (Stoll (2001) [208]).

Die gewünschte Skalierung der Eigenwerte wird durch eine Modifikation der Schallgeschwindigkeit und damit der Ausbreitungsgeschwindigkeiten akustischer Störungen erreicht. Die Kompressibilität in Bereichen schwach kompressibler Strömungen wird hierzu künstlich erhöht, wodurch die hohe Steifigkeit des Gleichungssystems bei sehr niedrigen Machzahlen behoben werden kann. Das Konzept einer „künstlichen Kompressibilität“ (engl.: artificial compressibility) zur Konvergenzbeschleunigung wurde zuerst an Lösern für inkompressible Strömungen entwickelt, welche auf der inkompressiblen Form der Euler- bzw. Navier-Stokes-Gleichungen beruhen (Chorin (1967) [29], Choi und Merkle (1985) [27]). Die Grundidee einer modifizierten Schallgeschwindigkeit wurde später auch auf Löser der kompressiblen Erhaltungsgleichungen übertragen, welche dadurch in der Lage sind, den gesamten Machzahl-Bereich von (nahe) inkompressiblen bis hin zu hypersonischen Strömungen abzudecken (Choi und Merkle (1993) [28]).

Aus der Definition der Schallgeschwindigkeit $a_s = \sqrt{(\partial p / \partial \rho)|_s} = \sqrt{c_p / c_v (\partial p / \partial \rho)|_T}$ (siehe Abschnitt 2.4.2.5) lässt sich folgender Ausdruck für die im CFD-Code modellierte Schallgeschwindigkeit herleiten (siehe Anhang E):

$$\tilde{a}_s^2 = \frac{\bar{\rho} \tilde{c}_p}{\bar{\rho} \tilde{c}_p \rho_p - \frac{\tilde{T}}{\bar{\rho}} \rho_T^2}. \quad (4.1.5)$$

Dabei werden hier und im weiteren Verlauf dieser Arbeit folgende Definitionen für eine übersichtlichere Darstellung verwendet:

$$\rho_p := \left(\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial \bar{p}} \right)_{\tilde{T}, \{\tilde{Y}_\alpha\}}, \quad \rho_T := \left(\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial \tilde{T}} \right)_{\bar{p}, \{\tilde{Y}_\alpha\}}, \quad \rho_{Y_\alpha} := \left(\frac{\partial \bar{\rho}}{\partial \tilde{Y}_\alpha} \right)_{\tilde{T}, \bar{p}, \{\tilde{Y}_{\beta \neq \alpha}\}}. \quad (4.1.6)$$

Durch den Präkonditionierer kann dementsprechend über eine Modifikation der Terme ρ_p , ρ_T und $\tilde{c}_p = (\partial \tilde{h} / \partial \tilde{T})|_{\bar{p}, \{\tilde{Y}\}}$ Einfluss auf die (modellierte) Schallgeschwindigkeit \tilde{a}_s genommen werden. Der in dieser Arbeit verwendete Weiss-Smith-Präkonditionierer (Weiss und Smith (1995) [239]) ändert lediglich den Term ρ_p . Dafür wird allerdings der direkte Zugriff auf den Druck benötigt, welcher im konservativen Variablensatz \mathbf{Q}_c nicht enthalten ist. Um dies zu erreichen, wird das Gleichungssystem mit Hilfe einer Variablentransformation auf einen anderen Variablensatz transformiert. Der neue Variablenvektor muss dabei den Druck ent-

halten⁴². Um für das verwendete, implizite Verfahren möglichst einfache Ableitungen in den Jakobimatrizen zu erhalten, empfiehlt sich die Verwendung des primitiven Variablenvektors

$$\mathbf{Q}_p = \left[\bar{p}, \{\tilde{u}_\ell\}, \tilde{T}, K, \omega, \{\tilde{Y}_\alpha\} \right]^T. \quad (4.1.7)$$

Alternative Variablensätze, die den Druck enthalten, sind jedoch möglich⁴³. Mit der Transformationsmatrix

$$\mathbb{T} := \frac{\partial \mathbf{Q}_c}{\partial \mathbf{Q}_p} \quad (4.1.8)$$

und der Definition

$$\mathbb{I} := \mathbb{P}^{-1} \mathbb{T} \quad (4.1.9)$$

(ab hier anstatt \mathbb{P} Präkonditionierungsmatrix genannt) lässt sich der präkonditionierte Zeitableitungsterm aus Glg. (4.1.4) im neuen Variablensatz \mathbf{Q}_p folgendermaßen schreiben:

$$\mathbb{P}^{-1} \frac{\partial \mathbf{Q}_c}{\partial \tau} = \mathbb{P}^{-1} \frac{\partial \mathbf{Q}_c}{\partial \mathbf{Q}_p} \frac{\partial \mathbf{Q}_p}{\partial \tau} = \mathbb{I} \frac{\partial \mathbf{Q}_p}{\partial \tau}. \quad (4.1.10)$$

Die Matrix \mathbb{I} ist zugleich Präkonditionierer und Transformationsmatrix. Die Zeitintegration (in Pseudo-Zeit) findet nun in primitiven Variablen statt.

Die in TASC3D (Stoll (2001) [208], Simsont und Gerlinger (2016) [198]) enthaltene Präkonditionierung musste im Hinblick auf die Verwendung von Realgasgleichungen angepasst werden. Die Transformationsmatrix \mathbb{T} und die Präkonditionierungsmatrix \mathbb{I} lassen sich dann für die zuvor angegebenen Vektoren \mathbf{Q}_c und \mathbf{Q}_p und für den in TASC3D (Stoll (2001) [208], Simsont und Gerlinger (2016) [198]) verwendeten Präkonditionierer von Weiss und Smith (1995) [239] wie folgt als allgemeine Matrix \mathbb{M} darstellen⁴⁴:

⁴² Für die Simulation von Außenströmungen, bei denen ein relativ gleichmäßiger Referenzdruck im gesamten Rechenggebiet aufgeprägt wird, empfiehlt sich die Verwendung eines Relativdrucks (engl.: gauge pressure) $p_{\text{rel}} = p - p_{\text{ref}}$ bezüglich eines Referenzdrucks p_{ref} . Dadurch können Auslöschungsfehler durch die limitierte Anzahl an signifikanten Stellen in der Gleitkommaarithmetik verringert werden (Meng und Yang (2003) [139]). Für Innenströmungen mit stark veränderlichem Druck wie in Raketenbrennkammern ergibt sich jedoch kein Vorteil.

⁴³ In der Literatur findet sich oft die Enthalpie h anstatt der Temperatur T (z. B. Meng und Yang (2003) [139]). Letztere muss dann jedoch aufwendig und iterativ aus der Enthalpie und dem Druck bzw. der Dichte berechnet werden.

⁴⁴ Einträge in eckigen Klammern repräsentieren Untermatrizen der Matrix \mathbb{M} .

$$\mathbb{M} = \begin{bmatrix} \theta_p & \{0\} & \theta_T & 0 & 0 & \{\theta_{Y_\beta}\} \\ \{\tilde{u}_\ell \theta_p\}^T & [\bar{\rho} \delta_{\ell m}] & \{\tilde{u}_\ell \theta_T\}^T & \{0\}^T & \{0\}^T & [\tilde{u}_\ell \theta_{Y_\beta}] \\ \tilde{h}_{\text{tot}} \theta_p + \frac{\tilde{T}}{\bar{\rho}} \theta_T & \{\bar{\rho} \tilde{u}_m\} & \bar{\rho} \tilde{c}_p + \tilde{h}_{\text{tot}} \theta_T & K' & 0 & \{\tilde{h}_{\text{tot}} \theta_{Y_\beta} + \bar{\rho} (\tilde{h}_\beta - \tilde{h}_{N_{\text{sp}}})\} \\ K \theta_p & \{0\} & K \theta_T & \bar{\rho} & 0 & \{K \theta_{Y_\beta}\} \\ \omega \theta_p & \{0\} & \omega \theta_T & 0 & \bar{\rho} & \{\omega \theta_{Y_\beta}\} \\ \{\tilde{Y}_\alpha \theta_p\}^T & [0] & \{\tilde{Y}_\alpha \theta_T\}^T & \{0\}^T & \{0\}^T & [\tilde{Y}_\alpha \theta_{Y_\beta} + \bar{\rho} \delta_{\alpha\beta}] \end{bmatrix} \begin{matrix} \} \ell = 1, \dots, N_{\text{dim}} \\ \\ \\ \} \alpha = 1, \dots, N_{\text{sp}} \end{matrix}$$

$\underbrace{m = 1, \dots, N_{\text{dim}}}$
 $\underbrace{\beta = 1, \dots, N_{\text{sp}}}$

mit

$$K' := \frac{\partial(\bar{\rho} \tilde{e}_{\text{tot}})}{\partial K} = \begin{cases} 2 \bar{\rho} q & \text{für } K = q, \\ \bar{\rho} & \text{für } K = k. \end{cases} \quad (4.1.11)$$

Eine Herleitung der Jakobieinträge der Totalenergie in Glg. (4.1.11) findet sich in Anhang E. Die partiellen Ableitungen der Dichte wurden bereits in Abschnitt 2.4.2.5 präsentiert. Die Transformationsmatrix \mathbb{T} sowie die Präkonditionierungsmatrix $\mathbb{I}\mathbb{F}$ für den Weiss-Smith-Präkonditionierer (Weiss und Smith (1995) [239]) gehen wie folgt aus der Matrix \mathbb{M} hervor⁴⁵:

$$\theta_p \equiv \rho_p, \quad \theta_T \equiv \rho_T, \quad \theta_{Y_\beta} \equiv \rho_{Y_\beta} \quad \implies \quad \mathbb{T} \equiv \mathbb{M}, \quad (4.1.12)$$

$$\theta_p \equiv 1/\beta, \quad \theta_T \equiv \rho_T, \quad \theta_{Y_\beta} \equiv \rho_{Y_\beta} \quad \implies \quad \mathbb{I}\mathbb{F} \equiv \mathbb{M}. \quad (4.1.13)$$

Anstatt einen Präkonditionierer \mathbb{P} und mit der anschließenden Variablentransformation die Präkonditionierungsmatrix $\mathbb{I}\mathbb{F}$ über eine rechenintensive Matrix-Matrix-Multiplikation zu bestimmen, werden die Eigenwerte des Systems direkt modifiziert, indem bestimmte Einträge in der $\mathbb{I}\mathbb{F}$ -Matrix im Vergleich zur \mathbb{T} -Matrix ersetzt werden. Im Falle des Weiss-Smith-Präkonditionierers werden alle Ausdrücke $\rho_p = (\partial \bar{\rho} / \partial p)|_{\tilde{T}, \{\tilde{Y}_\alpha\}}$ durch einen Skalierungsfaktor $1/\beta$ ersetzt. Dieser wird so gewählt, dass für verschwindende Machzahlen $\text{Ma} \rightarrow 0$ alle Eigenwerte des reibungsfreien Gleichungssystems auf die Größenordnung $\mathcal{O}(|\mathbf{u}|)$ skaliert werden und damit $\text{Ko} = \mathcal{O}(1)$ gilt.

Zur Bestimmung der entsprechenden Eigenwerte wird das präkonditionierte Gleichungssystem in der Form von Glg. (4.1.3) mit $\mathbb{I}\mathbb{F}$ anstatt \mathbb{P} und Vernachlässigung des Quellterms sowie der diffusiven Flüsse herangezogen. Zunächst wird zur einfacheren Erläuterung der Wirkweise der Präkonditionierung die differentielle Form des Gleichungssystems (3.1.1) behandelt. Dabei wird vorerst eine eindimensionale Betrachtung durchgeführt. Die gewonnenen Erkennt-

⁴⁵ Im Präkonditionierer von Choi und Merkle (1993) [28] ist hingegen $\theta_T = 0$.

nisse lassen sich im Anschluss auf die im Finite-Volumen Verfahren verwendete mehrdimensionale, integrale Form des Gleichungssystems (3.1.2) übertragen. In der eindimensionalen Betrachtung sei mit u_ℓ die Geschwindigkeit in der lokalen Strömungsrichtung ℓ bezeichnet. Die Eigenwerte $\lambda_{\ell,(i)}$ in der Raumrichtung ℓ , welche die Ausbreitungsgeschwindigkeiten der konvektiven und akustischen Störungen in diese Richtung darstellen, entsprechen dann den Nullstellen des charakteristischen Polynoms

$$\det \left| \mathbb{I}^{-1} \frac{\partial \mathbf{F}_{k,\ell}}{\partial \mathbf{Q}_p} - \lambda_\ell \mathbb{I} \right| = 0. \quad (4.1.14)$$

Dabei ist \mathbb{I} die Einheitsmatrix. Die Eigenwerte in ℓ -Richtung berechnen sich damit zu⁴⁶ (Lee (2012) [111])

$$\lambda_{\ell,(1,2)} = \frac{1}{2} \left[\tilde{u}_\ell \left(1 + \frac{\sigma \beta}{\tilde{a}_s^2} \right) \pm \sqrt{\tilde{u}_\ell^2 \left(1 - \frac{\sigma \beta}{\tilde{a}_s^2} \right)^2 + 4 \sigma \beta} \right] \quad (4.1.15)$$

$$\text{mit } \sigma = \frac{\bar{\rho} \tilde{c}_p}{\bar{\rho} \tilde{c}_p - \beta (T/\rho) \rho_T^2},$$

$$\lambda_{\ell,(3,\dots,\text{Dim}(\mathbf{Q}_c))} = \tilde{u}_\ell.$$

Im nächsten Schritt wird eine Modulierungsfunktion

$$f_\beta := \frac{\sigma \beta}{\tilde{a}_s^2} = \frac{\text{Ma}_o^2}{\text{Ma}_*^2} \quad (4.1.16)$$

mit der limitierten Machzahl⁴⁷

$$\text{Ma}_o = \min \left[1, \max \left(\text{Ma}, \min(\epsilon_o, k \text{Ma}_\infty) \right) \right], \quad (4.1.17)$$

der lokalen Machzahl $\text{Ma} = |\tilde{u}_\ell|/\tilde{a}_s$ und einer sogenannten Pseudo-Machzahl Ma_* definiert (Lee (2012) [111]). Der Präkonditionierungsfaktor β kann dann durch Kombination von Glg. (4.1.16) und der Definition von σ in Glg. (4.1.15) als Funktion der Modulierungsfunktion f_β ausgedrückt werden:

$$\beta = \frac{f_\beta \tilde{a}_s^2}{\sigma} = \frac{f_\beta \tilde{a}_s^2}{1 + f_\beta \tilde{a}_s^2 (T/\rho) \rho_T^2 / (\bar{\rho} \tilde{c}_p)} = \frac{f_\beta \tilde{a}_s^2}{1 + f_\beta (\tilde{c}_p/\tilde{c}_v - 1)}. \quad (4.1.18)$$

⁴⁶ $\text{Dim}(\mathbf{Q}_c)$ ist die Dimension des Vektors \mathbf{Q}_c . Gleichung (4.1.15) mit der gegebenen Definition von σ gilt allgemein auch für reale Fluide. In Lee (2012) [111] ist lediglich ein Ausdruck für ideale Gase zu finden.

⁴⁷ Choi und Merkle (1993) [28] empfehlen $\epsilon_o = 10^{-5}$. Diese untere Schranke soll den zunehmenden Einfluss von Auslöschungsfehlern in der Gleitkommaarithmetik bei sehr niedrigen Machzahlen begrenzen und eine Divergenz der Lösung an Staupunkten verhindern (Lee (2012) [111]). In dieser Arbeit wurde ein Wert von 10^{-2} verwendet, da niedrigere Werte oft zu Instabilitäten in den CFD-Simulationen führten. Die Limitierung durch $k \text{Ma}_\infty$ ist nur in den Fällen sinnvoll, in denen eine charakteristische Machzahl Ma_∞ für die Kernströmung angegeben werden kann. Lee (2012) [111] gibt hier $k = 0,5$ an. Die Limitierung greift somit ohnehin nur für extrem niedrige Referenz-Machzahlen Ma_∞ .

Der Ausdruck auf der rechten Seite von Glg. (4.1.18) kann mit Hilfe von Glg. (4.1.5) hergeleitet werden (siehe Anhang E). Die akustischen Eigenwerte aus Glg. (4.1.15) lassen sich mit der Modulierungsfunktion f_β auch wie folgt darstellen (Lee (2012) [111]):

$$\lambda_{\ell,(1,2)} = \frac{1}{2} \left[\tilde{u}_\ell(1 + f_\beta) \pm \sqrt{\tilde{u}_\ell^2(1 - f_\beta)^2 + 4\tilde{a}_s^2 f_\beta} \right]. \quad (4.1.19)$$

Die zugehörige Konditionszahl ergibt sich mit Hilfe von Glg. (4.1.16) zu⁴⁸

$$\begin{aligned} \text{Ko}_\ell &= \frac{\max_i |\lambda_{\ell,(i)}|}{\min_i |\lambda_{\ell,(i)}|} = \frac{|\tilde{u}_\ell|(1 + f_\beta) + \sqrt{\tilde{u}_\ell^2(1 - f_\beta)^2 + 4\tilde{a}_s^2 f_\beta}}{\left| |\tilde{u}_\ell|(1 + f_\beta) - \sqrt{\tilde{u}_\ell^2(1 - f_\beta)^2 + 4\tilde{a}_s^2 f_\beta} \right|} \\ &= \frac{(1 + f_\beta) + \sqrt{(1 - f_\beta)^2 + 4/\text{Ma}_*^2}}{\left| (1 + f_\beta) - \sqrt{(1 - f_\beta)^2 + 4/\text{Ma}_*^2} \right|} \end{aligned} \quad (4.1.20)$$

und erreicht ihr Minimum im Grenzfall $f_\beta \sim \text{Ma}^2 \rightarrow 0$ (Lee (2012) [111]). Die beste Konditionszahl $\text{Ko} = 2 + f_\beta \rightarrow 2$ wird für $f_\beta \rightarrow 0$ und eine Pseudo-Machzahl Ma_* von $\sqrt{0,5} \approx 0,707$ erreicht (Lee (2012) [111]). Da die so aus Glg. (4.1.16) erhaltene Modulierungsfunktion $f_\beta = 2 \text{Ma}_0^2$ allerdings vorzeitig bei $\text{Ma} = \text{Ma}_* \approx 0,707$ in den unpräkonditionierten Wert $f_\beta = 1$ übergeht, schlägt Lee (2012) [111] folgende Formulierung für die Modulierungsfunktion vor⁴⁹:

$$f_\beta = \frac{2 \text{Ma}_0^2}{1 + \text{Ma}_0^2}. \quad (4.1.21)$$

Diese erfüllt nun die Bedingungen

$$\lim_{\text{Ma} \rightarrow 1} f_\beta = 1 \quad \Leftrightarrow \quad \lim_{\text{Ma} \rightarrow 1} (\max_i |\lambda_{\ell,(i)}|) = |\tilde{u}_\ell| + \tilde{a}_s, \quad (4.1.22)$$

$$\lim_{\text{Ma} \rightarrow 0} f_\beta = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \lim_{\text{Ma} \rightarrow 0} (\max_i |\lambda_{\ell,(i)}|) = |\tilde{u}_\ell|, \quad (4.1.23)$$

$$\text{und } |\tilde{u}_\ell| < \max_i |\lambda_{\ell,(i)}| < |\tilde{u}_\ell| + \tilde{a}_s \quad \forall \quad 0 < \text{Ma} < 1. \quad (4.1.24)$$

Die minimal mögliche Konditionszahl $\text{Ko} = 2$ für sehr niedrige Machzahlen wird weiterhin als Grenzwert beibehalten. Die so erhaltene Konditionszahl ist in Abhängigkeit der Machzahl in Abb. 4.1 dargestellt. Für Machzahlen $\text{Ma} \lesssim 0,5$ ergibt sich ein deutlich besser konditioniertes System als im unpräkonditionierten Fall.

Die Herleitung und Analyse der Präkonditionierung erfolgte aus Gründen der Anschaulichkeit für den 1D-Fall und anhand der differentiellen Form des zu lösenden Gleichungssystems (3.1.1), welches bei Verwendung der Finite-Differenzen Methode herangezogen wird. Für das

⁴⁸ Gleichung (4.1.20) gilt für $\text{Ma}_*^2 \geq 1/(2 + 2f_\beta)$, da dann $\min |\lambda_{\ell,(1,2)}| \leq |\lambda_{\ell,(3,\dots,\text{Dim}(\mathbf{Q}_c))}|$ (Lee (2012) [111]).

Mit $f_\beta > 0$ gilt Glg. (4.1.20) also unter der Bedingung $\text{Ma}_*^2 > 1/2$.

⁴⁹ Gleichung (4.1.20) gilt mit dieser Formulierung weiterhin unter der Bedingung $-f_\beta/(1 + f_\beta) \leq 0 \leq \text{Ma}_0^2$, welche mit $f_\beta > 0$ stets erfüllt ist.

in dieser Arbeit verwendete, zwei - bzw. dreidimensionale Finite-Volumen Verfahren, welches auf der integralen Schreibweise (Glg. (3.1.2)) beruht, werden die Eigenwerte auf den Zellseiten benötigt. Diese enthalten im Gegensatz zu vorher noch die entsprechenden Metriken der Zellseiten und sind für eine Zellseite f durch das charakteristische Polynom

$$\det \left| \mathbb{I}^{-1} \frac{\partial \mathbf{F}_{k,\ell,f}}{\partial \mathbf{Q}_p} S_{\ell,f} - \lambda_f \mathbb{I} \right| = 0 \quad (4.1.25)$$

bestimmt⁵⁰. Die Eigenwerte auf jeder der N_F Zellseiten einer Finite-Volumen Zelle mit den Einträgen $S_{\ell,f}$ der zugehörigen Flächennormalenvektoren lauten dann (Colin et al. (2011) [34])

$$\lambda_{f,(1,2)} = \frac{1}{2} \left[\mathfrak{U}_f (1 + f_\beta) \pm \sqrt{\mathfrak{U}_f^2 (1 - f_\beta)^2 + 4 \tilde{a}_s^2 f_\beta |S_f|^2} \right], \quad (4.1.26)$$

$$\lambda_{f,(3,\dots,N_{\text{Dim}(\mathbf{Q}_c)})} = \mathfrak{U}_f$$

$$\text{mit } \mathfrak{U}_f = \tilde{u}_{\ell,f} S_{\ell,f} \text{ und } |S_f| = \|S_{\ell,f} S_{\ell,f}\|_2,$$

wobei alle Werte lokal auf der entsprechenden Zellseite zu berechnen sind. Um den Rechenaufwand möglichst gering zu halten, werden im verwendeten CFD-Code TASC3D bis auf die Zellmetriken jedoch alle Werte aus den schon berechneten Werten in den Zellmittelpunkten der angrenzenden Zellen genommen.

4.1.2 Präkonditionierung und Diskretisierung des physikalischen Zeitableitungsterms für instationäre Simulationen

Für instationäre Strömungen bleibt der physikalische Zeitableitungsterm aus Glg. (3.1.1) erhalten. Um weiterhin alle Mittel zur Konvergenzbeschleunigung wie lokale Zeitschritte, Multigittertechnik und die Präkonditionierung nutzen zu können, wird in TASC3D analog zum stationären Verfahren wieder ein künstlicher Zeitableitungsterm in Pseudo-Zeit eingeführt (Stoll (2001) [208], Simsont und Gerlinger (2016) [198]). Die „physikalischen“ Terme können wiederum mit der Präkonditionierungsmatrix multipliziert werden. Durch Variablentransformation wird wie zuvor auf den primitiven Variablensatz übergegangen (Stoll (2001) [208], Simsont und Gerlinger (2016) [198]):

$$\frac{\partial \mathbf{Q}_c}{\partial \tau} = \mathbb{P} \left(-\frac{\partial \mathbf{Q}_c}{\partial t} - \frac{\partial \mathbf{F}_\ell}{\partial x_\ell} + \mathbf{S} \right) \quad (4.1.27)$$

$$\Leftrightarrow \mathbb{I}^{-1} \frac{\partial \mathbf{Q}_p}{\partial \tau} = -\frac{\partial \mathbf{Q}_c}{\partial t} - \frac{\partial \mathbf{F}_\ell}{\partial x_\ell} + \mathbf{S}. \quad (4.1.28)$$

⁵⁰ Dabei wird nicht über den Index f der Zellseiten, jedoch über den Index ℓ der Raumrichtungen summiert.

Die Zeitintegration erfolgt im sogenannten Dual-Time-Stepping Zeitschrittverfahren (Venkateswaran und Merkle (1995) [228]). Dabei schreitet die Lösung in der physikalischen Zeit t um einen festen Zeitschritt Δt voran. Der Fortschritt der Lösung von einem physikalischen Zeitpunkt zum nächsten erfolgt iterativ über (innere) Subiterationen in der Pseudo-Zeit τ mit dem (lokalen) Pseudo-Zeitschritt $\Delta \tau$. Wie im stationären Fall ergibt sich für eine auskonvergierte Lösung in Pseudo-Zeit wieder das ursprüngliche, zeitechte Gleichungssystem, so dass das Zeitintegrationsverfahren zeitechte ist. Die Residuen jeder Zelle (entspricht etwa der rechten Seite von Glg. (4.1.28)) sollten in den inneren Iterationen um drei bis vier Größenordnungen reduziert werden, um die Zeitgenauigkeit des Verfahrens nicht zu sehr zu beeinträchtigen (Venkateswaran und Merkle (1995) [228]). Der Einsatz der Präkonditionierung für instationäre Simulationen kann zu einer Konvergenzbeschleunigung in den inneren Iterationen führen, jedoch ist der Rechenvorteil insbesondere bei kleinen physikalischen Zeitschritten in der Regel deutlich geringer als in stationären Simulationen (Venkateswaran und Merkle (1995) [228]).

Die Ordnung der zeitlichen Diskretisierung des Ableitungsterms in Pseudo-Zeit ist für die Genauigkeit der Lösung im auskonvergierten Zustand der inneren Iteration unerheblich. Deshalb empfiehlt sich wie im Falle stationärer Simulationen ein implizites Euler-Verfahren, da dieses größtmögliche Stabilität gewährleistet. Für die Zeitintegration der physikalischen Terme in der äußeren Iteration wird in TASCOM3D aus Gründen der Genauigkeit und Stabilität ein implizites BDF (engl.: backward differentiation formula) Verfahren, auch Gear-Verfahren genannt, verwendet, welches durch rückwärtige Diskretisierung des zeitechten Ableitungsterms höhere Ordnung zulässt (Gerlinger (2005) [58]). Im BDF Verfahren erster und zweiter Ordnung kann der diskretisierte, physikalische Zeitableitungsterm bei konstantem Zeitschritt ($\Delta t = \text{konst.}$) allgemein geschrieben werden als

$$\frac{\partial \mathbf{Q}_c}{\partial t} \approx \frac{a_1 \mathbf{Q}_c^{n+1} + a_2 \mathbf{Q}_c^n + a_3 \mathbf{Q}_c^{n-1}}{\Delta t} \quad (4.1.29)$$

$$\begin{aligned} \text{mit } a_1 = 1 \quad , \quad a_2 = -1 \quad , \quad a_3 = 0 & \quad \text{für 1. Ordnung,} \\ \text{und } a_1 = 3/2 \quad , \quad a_2 = -2 \quad , \quad a_3 = 1/2 & \quad \text{für 2. Ordnung.} \end{aligned}$$

Der Index n kennzeichnet den Iterationsschritt der äußeren Zeitintegrationsschleife (Fortschritt in physikalischer Zeit). Der Einsatz von BDF-Verfahren höherer Ordnungen ist möglich, allerdings geht dies mit einem Verlust an Stabilität einher. In dieser Arbeit wurde nur das Verfahren 2. Ordnung eingesetzt. Zu Beginn einer Simulation muss zunächst mit 1. Ordnung gestartet werden, da \mathbf{Q}_c^{n-1} nicht existiert. Ebenso gilt dies beim Wiederstarten von einer vorangegangenen Lösung, wenn \mathbf{Q}_c^{n-1} in der Lösungsdatei nicht mitabgespeichert wird.

4.1.3 Implizites Zeitintegrationsverfahren

Sowohl für stationäre als auch instationäre Simulationen wird der zeitliche Ableitungsterm in Pseudo-Zeit mit dem impliziten Euler-Verfahren diskretisiert. Das zeitlich diskretisierte Gleichungssystem nimmt dann folgende Form an (Stoll (2001) [208]):

$$\mathbb{T}^p \frac{\mathbf{Q}_p^{p+1} - \mathbf{Q}_p^p}{\Delta\tau} + \frac{a_1 \mathbf{Q}_c^{p+1} + a_2 \mathbf{Q}_c^n + a_3 \mathbf{Q}_c^{n-1}}{\Delta t} = - \frac{\partial \mathbf{F}_\ell^{p+1}}{\partial x_\ell} + \mathbf{S}^{p+1}. \quad (4.1.30)$$

Der Index p kennzeichnet den Iterationsfortschritt der inneren Iterationsschleife (Fortschritt in Pseudo-Zeit). Für stationäre Simulationen entfällt der physikalische Zeitableitungsterm und damit die äußere Iterationsschleife (Index n). Bei instationären Simulationen gilt für den Fall einer konvergierten Lösung in den inneren Subiterationen $\mathbf{Q}_p^{n+1} = \mathbf{Q}_p^{p+1} = \mathbf{Q}_p^p$ und $\mathbf{Q}_c^{n+1} = \mathbf{Q}_c^{p+1} = \mathbf{Q}_c^p$. Die Zeitintegration erfolgt in beiden Fällen implizit. Das Gleichungssystem (4.1.30) muss deshalb iterativ gelöst werden. Zu diesem Zweck kommt ein Newton-Raphson-Verfahren zum Einsatz, welches auf der Linearisierung der Terme zum Iterationsschritt $p+1$ um den Zeitpunkt p in Pseudo-Zeit aufbaut (Gerlinger (2005) [58]). Die linearisierten Terme lassen sich mit $\Delta \mathbf{Q}_p^p = \mathbf{Q}_p^{p+1} - \mathbf{Q}_p^p$ folgendermaßen schreiben:

$$\mathbf{Q}_p^{p+1} = \mathbf{Q}_p^p + \Delta \mathbf{Q}_p^p, \quad (4.1.31)$$

$$\mathbf{Q}_c^{p+1} = \mathbf{Q}_c^p + \mathbb{T}^p \Delta \mathbf{Q}_p^p, \quad (4.1.32)$$

$$\mathbf{F}_\ell^{p+1} = \mathbf{F}_\ell^p + \underbrace{\left(\frac{\partial \mathbf{F}_\ell}{\partial \mathbf{Q}_p} \right)^p}_{=: \mathbb{J}_{F_\ell}} \Delta \mathbf{Q}_p^p, \quad (4.1.33)$$

$$\mathbf{S}^{p+1} = \mathbf{S}^p + \underbrace{\left(\frac{\partial \mathbf{S}}{\partial \mathbf{Q}_p} \right)^p}_{=: \mathbb{J}_S} \Delta \mathbf{Q}_p^p. \quad (4.1.34)$$

Die Jakobimatrizen der Flüsse und des Quellterms \mathbb{J}_{F_ℓ} und \mathbb{J}_S sind in TASC3D als analytische Ableitungen der Fluss- und Quelltermvektoren \mathbf{F} und \mathbf{S} aus den Gleichungen (3.1.6), (3.1.7) und (3.1.4) gebildet (Gerlinger (1995) [56], Stoll (2001) [208]). Dabei wird für die diffusiven Flüsse vereinfachend die Thin-Layer-Approximation zur Bildung der Jakobimatrizen der diffusiven Flüsse herangezogen (Shuen (1992) [194], Stoll (2001) [208]). Für die Turbulenztransportgleichungen werden aus Stabilitätsgründen nur die negativen Einträge (Senken) in der Quellterm-Jakobimatrix implizit behandelt (Gerlinger (1995) [56], Lian et al. (2009) [121]). Die Beiträge in den Fluss-Jakobimatrizen sowie den Quellterm-Jakobimatrizen aufgrund von Turbulenz, Reaktionen⁵¹ und Gravitation können der Arbeit von Stoll (2001) [208]

⁵¹ Da die chemischen Reaktionen in dieser Arbeit nur im Idealgasbereich betrachtet werden, entsprechen sowohl der chemische Quellterm (siehe Glg. (3.3.9)) als auch die zugehörige Jakobimatrix den Ausdrücken für ideale Gase.

entnommen werden. Die zusätzlichen Quellterm-Jakobimatrizen für 2D-achsensymmetrische Simulationen finden sich in Meng und Yang (2003) [139]. Aufgrund der Variablentransformation werden die Ableitungen in den Jakobimatrizen in den primitiven Variablen gebildet. Dies stellt eine deutliche Vereinfachung gegenüber Ableitungen nach den konservativen Variablen dar, wie sie im nicht-präkonditionierten System gebildet werden müssen. Das in TASCOM3D gelöste, zeitlich linearisierte Gleichungssystem lautet dann (Stoll (2001) [208])

$$\left[\frac{1}{\Delta\tau} \mathbb{I}^p + \frac{a_1}{\Delta t} \mathbb{T}^p + \frac{\partial \mathbb{J}_{F_\ell}^p}{\partial x_\ell} - \mathbb{J}_S^p \right] \Delta \mathbf{Q}_p^p = \left[-\frac{a_1 \mathbf{Q}_c^p + a_2 \mathbf{Q}_c^n + a_3 \mathbf{Q}_c^{n-1}}{\Delta t} - \frac{\partial \mathbf{F}_\ell^p}{\partial x_\ell} + \mathbf{S}^p \right]. \quad (4.1.35)$$

Der Lösungsfortschritt im impliziten System (4.1.35) erfolgt in primitiven Variablen anhand von Glg. (4.1.31). Der konservative Variablenvektor lässt sich dann als Funktion des unabhängigen, primitiven Variablenvektors darstellen : $\mathbf{Q}_c^{p+1} = \mathbf{Q}_c^{p+1}(\mathbf{Q}_p^{p+1})$. Dies gewährleistet im Gegensatz zu Glg. (4.1.32) in jedem Iterationsschritt Konsistenz zwischen dem konservativen Variablensatz \mathbf{Q}_c und dem primitiven Variablensatz \mathbf{Q}_p und ist zudem wesentlich effizienter.

4.1.4 Bestimmung des Zeitschritts

Zur Konvergenzbeschleunigung wird in TASCOM3D in jeder Zelle ein lokaler (Pseudo-)Zeitschritt $\Delta\tau$ verwendet (Gerlinger (1995) [56], Stoll (2001) [208]), welcher durch das Stabilitätskriterium der CFL-Zahl (Courant-Friedrichs-Lewy-Zahl) limitiert ist (Hirsch (2007) [79]). Zunächst wird wiederum nur das stationäre, reibungsfreie Gleichungssystem (3.1.2) ohne Quellterme betrachtet. Für das Finite-Volumen Verfahren ist der (lokal) maximal wählbare Zeitschritt für jede Zelle mit dem Zellvolumen Ω dann durch die kritische CFL-Zahl CFL_{krit} begrenzt (Stoll (2001) [208]):

$$\text{CFL} = \frac{0,5 \sum_{f=1}^{N_F} \max_i |\lambda_{f,(i)}| \Delta\tau}{\Omega} < \text{CFL}_{\text{krit}} \quad \Leftrightarrow \quad \Delta\tau < \frac{\text{CFL}_{\text{krit}} \Omega}{0,5 \sum_{f=1}^{N_F} \max_i |\lambda_{f,(i)}|}. \quad (4.1.36)$$

Das hier verwendete, implizite Euler-Verfahren zur Zeitintegration in Pseudo-Zeit erlaubt sehr große CFL-Zahlen und damit auch Zeitschritte. Durch verschiedene Approximationen (z. B. in den Jakobimatrizen oder durch Faktorisierungsfehler im LU-SGS Lösungsverfahren) kann es jedoch zu Einschränkungen der CFL-Zahl kommen. Vor allem zu Beginn einer Simulation müssen die CFL-Zahl und damit die Zeitschritte in der Regel deutlich kleiner gewählt werden.

Der maximal wählbare Zeitschritt und die Konvergenz hängen nicht nur vom Gleichungssystem, der Diskretisierung und dem verwendeten Lösungsverfahren ab, sondern über die Eigenwerte auch von den lokalen Strömungsbedingungen. Während Gebiete mit schneller Strömung sich schnell an Störungen anpassen und damit gut konvergieren, ist die Konvergenzrate in Gebieten kleiner Machzahlen wesentlich schlechter. Der Grund hierfür ist die lokal schlechte Konditionszahl. Dadurch, dass sich die konvektiven Störungen nur mit niedriger Geschwindigkeit $\mathcal{O}(|\mathbf{u}|)$ ausbreiten, der Zeitschritt jedoch durch die in der Regel viel größere

Schallgeschwindigkeit über die Eigenwerte in Glg. (4.1.36) limitiert wird, schreitet die Lösung in diesen Gebieten nur sehr langsam voran. An dieser Stelle greift die Präkonditionierung, welche alle Eigenwerte auf die Größenordnung $\mathcal{O}(|\mathcal{U}|)$ (siehe Glg. (4.1.26)) skaliert. Dadurch können in Gebieten langsamer Strömungen wesentlich größere Zeitschritte verwendet und die Konvergenz deutlich verbessert werden.

In reibungsdominierten Gebieten, in denen die Diffusionsgeschwindigkeiten eine wichtige Rolle spielen, wird die Zeitschrittberechnung in TASCOM3D aufbauend auf Untersuchungen von Kunz und Lakshminarayana in der Form von Stoll (2001) [208] mit weiteren Vereinfachungen wie folgt modifiziert⁵²:

$$\Delta\tau < \frac{\text{CFL}_{\text{krit}}}{0,5 \sum_{f=1}^{N_F} \max_i |\lambda_{f,(i)}| / \Omega + 8 \mu_{\text{eff}} \nabla \xi_j \nabla \xi_j / \bar{\rho}} \quad (4.1.37)$$

Dabei repräsentieren die Gradienten $\nabla \xi_j$ die Einträge der metrischen Jakobimatrizen (siehe Stoll (2001) [208]).

4.2 Räumliche Diskretisierung

4.2.1 Finite-Volumen Methode

Die Herleitung der zeitlich diskretisierten Grundgleichungen (4.1.35) basierte auf deren differentieller Form (Glg. (3.1.1)). Der in dieser Arbeit verwendete CFD-Code TASCOM3D löst jedoch die Strömungsgleichungen mit einem zellzentrierten Finite-Volumen Verfahren (Gerlinger (1995) [56], Stoll (2001) [208], Versteeg und Malalasekera (2007) [230]). Deshalb müssen die Grundgleichungen in integraler Form (Glg. (3.1.2)) herangezogen werden. Die zeitlich und räumlich diskretisierten Gleichungen in integraler Form für zeitlich unveränderliche Rechengitter und konstante physikalische Zeitschritte sind für jede diskrete Rechenzelle unter Zuhilfenahme des Gauß'schen Integralsatzes gegeben durch

$$\underbrace{\left[\frac{\Omega}{\Delta\tau} \mathbb{I}^p + \frac{a_1 \Omega}{\Delta t} \mathbb{T}^p + \mathbb{J}_{F_{\ell,f}}^p S_{\ell,f} - \Omega \mathbb{J}_S^p \right]}_{\text{LHS}} \Delta \mathbf{Q}_p^p = \underbrace{\left[-\frac{\Omega}{\Delta t} (a_1 \mathbf{Q}_c^p + a_2 \mathbf{Q}_c^n + a_3 \mathbf{Q}_c^{n-1}) - \mathring{\mathbf{F}}_{\ell,f}^p S_{\ell,f} + \Omega \mathbf{S}^p \right]}_{\text{RHS}}. \quad (4.2.1)$$

Dabei wird sowohl über die Zellseitenflächen (Index f) als auch die betrachteten Raumrichtungen (Index ℓ) aufsummiert. Die Flüsse und deren Jakobimatrizen sind jeweils auf den Mittelpunkten der Zellseiten zu berechnen, alle anderen Terme in den Zellmittelpunkten.

⁵² Ein möglicher Realgaseinfluss auf die Zeitschrittsteuerung wurde in dieser Arbeit nicht untersucht.

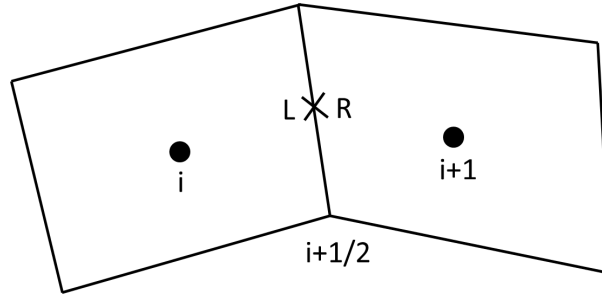


Abbildung 4.2: Links- und rechtsseitige Werte einer Zellseitenfläche.

Die Abkürzungen RHS (Rechte-Hand-Seite) und LHS (Linke-Hand-Seite) stehen für die expliziten und impliziten Anteile in Glg. (4.2.1). Deren Diskretisierung muss nicht unbedingt gleich erfolgen. Während die Diskretisierung der RHS die räumliche Genauigkeit des numerischen Verfahrens bestimmt, muss die Diskretisierung der LHS lediglich eine hinreichende Approximation der RHS sein, damit das Lösungsverfahren robust ist und konvergiert. Für den Fall einer konvergierten Lösung ($\Delta \mathbf{Q}_p^p \rightarrow 0$) hat die Diskretisierung der LHS jedoch keinen Einfluss auf die Genauigkeit des Verfahrens.

Wird für beide Seiten die gleiche Diskretisierung gewählt, d.h. die Jakobimatrizen stellen exakte Ableitungen der Fluss- und Quelltermvektoren dar, so entspricht Glg. (4.2.1) dem Newton-Raphson-Verfahren (Gerlinger (2005) [58]), ansonsten einem approximierten Newton-Raphson-Verfahren. Für die LHS werden in TASCUM3D wie zuvor beschrieben die (approximierten) Jakobimatrizen der analytischen Fluss- und Quelltermvektoren verwendet. Für die konvektiven Flüsse der RHS wird jedoch im Gegensatz zu den diffusiven Flüssen nicht der analytische Flussvektor \mathbf{F}_k aus Glg. (3.1.6), sondern der numerische Flussvektor $\mathring{\mathbf{F}}_k$ genommen (siehe Abschnitt 4.2.2.2). Das erhaltene Gleichungssystem (4.2.1) lässt sich effizient, parallelisiert und vektorisiert mit dem impliziten LU-SGS Verfahren lösen. Details hierzu finden sich in Gerlinger (1995) [56], Kindler (2014) [96] und Stoll (2001) [208].

4.2.2 Diskretisierung der konvektiven Flüsse

Die Flussvektoren der RHS werden im Finite-Volumen Verfahren (ebenso wie die entsprechenden Jakobimatrizen der LHS) auf den Zellseiten gebildet, wo jedoch keine Variablen abgespeichert sind. Soll nun der konvektive Fluss zwischen zwei Zellen i und $i + 1$ auf der Zellseite bei $i + 1/2$ (siehe Abb. 4.2) berechnet werden, so erfolgt dies in TASCUM3D in zwei Schritten:

1. Bestimmung der links- und rechtsseitigen Werte der Zellseite gekennzeichnet durch die Indizes L und R (siehe Abb. 4.2);
2. Berechnung des numerischen Flusses aus diesen Werten.

Schritt 1 erfolgt in dieser Arbeit durch eine Polynominterpolation bis fünfter Ordnung aus den Zellwerten benachbarter Punkte in Kombination mit einem (mehrdimensionalen) TVD-

Limiter (Total Variation Diminishing) nach Gerlinger (2012) [59]. Dies wird im Anschluss in Abschnitt 4.2.2.1 näher erläutert.

Schritt 2 stellt die Lösung des Riemann-Problems dar (Blazek (2001) [13]), also die Ausbreitung von Störungen in einem Strömungsfeld, welches ein unstetiges Verhalten auf der Zellseite $i + 1/2$ aufweist. In dieser Arbeit wird dafür die AUSM⁺-up (Advection Upstream Splitting Method) Fluss-Vektor-Splitting Methode von Liou (2006) [124] mit einer Modifikation nach Edwards et al. (2000) [43] für reale Fluide verwendet. Das AUSM⁺-up Verfahren gehört zur Familie der AUSM-Verfahren, welches ein hybrides Verfahren ist und als Charakteristiken die Effizienz der Fluss-Vektor-Splitting Verfahren und die Genauigkeit von Fluss-Differenz-Splitting Verfahren aufweist (Blazek (2001) [13], Liou (1996) [123]). Im Gegensatz zu zentralen Verfahren berücksichtigt es als Upwind-Verfahren durch vorzugsweise Verwendung stromauf gelegener Werte die Ausbreitungsrichtung konvektiver Störungen entlang der Hauptströmungsrichtung. Zudem ist es leicht erweiterbar für die Simulation realer Fluide. Eine Darstellung des AUSM⁺-up Verfahrens und dessen Besonderheiten im Zusammenhang mit der Simulation von realen Fluiden und der verwendeten Präkonditionierung findet sich in Abschnitt 4.2.2.2.

4.2.2.1 Polynomrekonstruktion, TVD-Limiter und MLP

Als links- und rechtsseitige Werte auf einer Zellseite $i + 1/2$ werden im einfachsten Fall die Zellwerte der angrenzenden Zellen i und $i + 1$ verwendet. Dies erlaubt jedoch nur räumliche Diskretisierungsverfahren höchstens zweiter Ordnung⁵³. Für die Realisierung höherer Diskretisierungsordnungen können Polynominterpolationen hoher Ordnung eingesetzt werden, welche zusätzlich die Information entfernter Nachbarzellen nutzen. In TASCOM3D ist für das AUSM⁺-up Diskretisierungsverfahren eine Rekonstruktion der Zellseitenwerte mit Polynomen bis 5. Ordnung möglich (Gerlinger (2012) [59]). Da dies bei unstetigen Lösungen (z. B. an Verdichtungsstößen) und in Bereichen hoher Gradienten (z. B. an Flammenfronten, in Scherschichten) ein unphysikalisches Überspringen der interpolierten links- und rechtsseitigen Werte zur Folge haben kann, sind Limitierungen nötig. Im eindimensionalen Fall sorgen sogenannte (Slope-)Limiter-Funktionen dafür, dass keine neuen, unphysikalischen Extrema bei der Polynomrekonstruktion auftreten, indem sie lokal die Werte limitieren und damit die Einhaltung der TVD-Eigenschaft sicherstellen⁵⁴ (Blazek (2001) [13], Hirsch (2007) [79]). Greift die Limitierung, wird lokal die Ordnung des Verfahrens abgesenkt, die Stabilität jedoch verbessert.

Ein beliebtes Verfahren, welches eine Genauigkeit bis zu dritter Ordnung zulässt und die TVD-Eigenschaft (im Eindimensionalen) erfüllt, ist MUSCL (Monotonic Upstream-Centered

⁵³ Diese wird bei zentraler Diskretisierung auf orthogonalen, äquidistanten Gittern und unter Vernachlässigung des Einflusses künstlicher Dämpfungsterme erreicht.

⁵⁴ Die TVD-Eigenschaft ist nur für die interpolierten Variablen gesichert, Für davon abhängige Variablen ist dies vor allem bei stark nichtlinearen Zusammenhängen nicht gewährleistet.

Scheme for Conservation Laws) von van Leer (1979) [226]. In TASCUM stehen mit einer Verfahrensgenauigkeit bis zweiter Ordnung verschiedene (eindimensionale) TVD-Limiter von van Leer (1974) [225], Roe (1986) [184] und van Albada et al. (1982) [223] zur Verfügung. Die Genauigkeit und Stabilität des Limiters von van Leer (1974) [225] liegt zwischen den diffusiveren, aber stabileren Limitern von Roe (1986) [184] (Minmod-Limiter) und van Albada et al. (1982) [223] sowie dem genaueren, aber instabileren Superbee-Limiter von Roe (1986) [184] (Hirsch (2007) [79], Lempke et al. (2015) [116]). Letzterer kann Unstetigkeiten wie Verdichtungsstöße und Kontaktunstetigkeiten (z. B. an Phasengrenzen) sehr genau abbilden, hat jedoch den Nachteil, Gradienten vor allem in Gebieten mit glatter Lösung unphysikalisch zu verstärken (Hirsch (2007) [79]).

In dieser Arbeit wird eine Polynomrekonstruktion zweiter bis fünfter Ordnung verwendet. Letztere liefert vor allem in instationären Simulationen eine bessere Genauigkeit (Gerlinger (2012) [59], Lempke et al. (2015) [116], Simsont und Gerlinger (2016) [198]). Die Limitierung erfolgt über ein mehrdimensionales MLP^{ld}-Verfahren (Multi-Dimensional Limiting Process low diffusion) von Kim und Kim (2005) [94] in der Version von Gerlinger (2012) [59] (van Leer MLP^{ld} im Falle zweiter Ordnung). Im Gegensatz zu gewöhnlichen, eindimensionalen TVD-Limitern berücksichtigt MLP^{ld} Werte aus benachbarten Zellen in allen Raumrichtungen und auch aus den diagonal an die Ecken angrenzenden Zellen. Dies sorgt für bessere Stabilitätseigenschaften bei nur geringem zusätzlichem Rechenaufwand.

4.2.2.2 AUSM⁺-up Verfahren für reale Fluide

Nach der Rekonstruktion der links- und rechtsseitigen Variablen⁵⁵ auf einer Zellseite werden diese im Anschluss dazu verwendet, die reibungsfreien Flüsse zu berechnen. Hier wird nur eine kurze Zusammenfassung des hierfür verwendeten AUSM⁺-up Verfahrens von Liou (2006) [124] mit einer Modifikation von Edwards et al. (2000) [43] für die Simulation realer Fluide gegeben. Die Darstellung erfolgt hier außerdem für das Finite-Volumen Verfahren.

Der erste Schritt im AUSM⁺-up Verfahren besteht darin, aus den rekonstruierten links- und rechtsseitigen Zellseitenwerten die links- und rechtsseitigen Machzahlen

$$\text{Ma}_{L/R} = \frac{\mathbf{u}}{a_{s,1/2}} \quad \text{mit} \quad \mathbf{u} = \frac{\mathfrak{U}}{|S|} = \frac{\tilde{u}_\ell S_\ell}{\|S_\ell S_\ell\|_2} \quad (4.2.2)$$

zu bestimmen. \mathbf{u} repräsentiert den Anteil der Geschwindigkeit senkrecht zur Zellseite und $a_{s,1/2}$ ist die Interface-Schallgeschwindigkeit, auf welche später noch näher eingegangen wird. Die gemittelte Machzahl ergibt sich dann zu

$$\text{Ma}_M = 0,5 \cdot (\text{Ma}_L + \text{Ma}_R) . \quad (4.2.3)$$

⁵⁵ Für das AUSM⁺-up Verfahren werden $\bar{\rho}, \bar{p}, \{\tilde{u}_\ell\}, K, \omega, \{\tilde{Y}_\alpha\}$ sowie \tilde{a}_s und die massenspezifische Totalenthalpie \tilde{h}_{tot} interpoliert.

Aus dieser kann, ähnlich zur Präkonditionierung (Glg. (4.1.17)) eine limitierten Machzahl

$$\text{Ma}_o = \min [1, \max (\text{Ma}_M, \text{Ma}_\infty)] \quad (4.2.4)$$

mit der charakteristischen Machzahl Ma_∞ des Problems gebildet werden. Mit der limitierten Machzahl wird die Skalierungsfunktion

$$f_{a_s} = \text{Ma}_o(2 - \text{Ma}_o) \quad (4.2.5)$$

berechnet. Nimmt man die mittlere Dichte $\rho_{1/2} = 0,5 \cdot (\bar{\rho}_L + \bar{\rho}_R)$, so ergeben sich die Interface-Machzahl $\text{Ma}_{1/2}$ und der Interface-Druck $p_{1/2}$ anschließend zu

$$\text{Ma}_{1/2} = \mathcal{M}_{(4)}^+ + \mathcal{M}_{(4)}^- - \underbrace{\frac{K_p}{f_{a_s}} \max(1 - \sigma \text{Ma}_M^2, 0)}_{M_p} \frac{\bar{p}_R - \bar{p}_L}{\rho_{1/2} a_{s,1/2}^2}, \quad (4.2.6)$$

$$p_{1/2} = \mathcal{P}_{(5)}^+ \bar{p}_L + \mathcal{P}_{(5)}^- \bar{p}_R - \underbrace{2 K_u \mathcal{P}_{(5)}^+ \mathcal{P}_{(5)}^- \rho_{1/2} f_{a_s} a_{s,1/2} (\tilde{u}_R - \tilde{u}_L)}_{p_u}. \quad (4.2.7)$$

Die Skalierungsfunktionen $\mathcal{M}_{(4)}^\pm$ und $\mathcal{P}_{(5)}^\pm$ sind Funktionen vierter bzw. fünfter Ordnung der linken bzw. rechten Machzahlen $\text{Ma}_{L/R}$ sowie der Skalierungsfunktion f_{a_s} (nur $\mathcal{P}_{(5)}^\pm$) und können ebenso wie die verwendeten Konstanten σ , K_p und K_u aus Liou (2006) [124] entnommen werden. Die Dämpfungsfunktionen M_p und p_u wirken dissipativ und somit stabilisierend. Zusammen mit der Skalierungsfunktion f_{a_s} bilden sie die Hauptunterschiede zum Vorgänger-Modell AUSM⁺ (Liou (1996) [123]). Der numerische Fluss aus Glg. (4.2.1) auf jeder Zellseite ergibt sich dann mit

$$\dot{m}_{1/2} \mathring{\mathbf{f}} = a_{s,1/2} \text{Ma}_{1/2} |S| \begin{cases} \rho_L \mathring{\mathbf{f}}_L & \text{wenn } \text{Ma}_{1/2} > 0, \\ \rho_R \mathring{\mathbf{f}}_R & \text{sonst} \end{cases} \quad (4.2.8)$$

und den Vektoren

$$\mathring{\mathbf{f}}_{L,R} = [1, \{\tilde{u}_\ell\}, \tilde{h}_{\text{tot}}, K, \omega, \{\tilde{Y}_\alpha\}]_{L,R}^T, \quad (4.2.9)$$

$$\mathring{\mathbf{p}} = p_{1/2} \cdot [0, \{S_\ell\}, 0, 0, 0, \{0\}]^T$$

zu

$$\mathring{\mathbf{F}}_\ell S_\ell = \dot{m}_{1/2} \mathring{\mathbf{f}} + \mathring{\mathbf{p}}. \quad (4.2.10)$$

Ein zentraler Punkt in den AUSM-Verfahren ist die Berechnung der Interface-Schallgeschwindigkeit $a_{s,1/2}$. Im ursprünglichen AUSM⁺-up Verfahren wird hierfür eine sogenannte kritische

Schallgeschwindigkeit

$$a_s^* = \frac{2(\tilde{\gamma} - 1)}{\tilde{\gamma} + 1} \tilde{h}_{\text{tot}} \quad (4.2.11)$$

aus der massenspezifischen Totalenthalpie \tilde{h}_{tot} und dem Adiabatenexponenten $\tilde{\gamma} = \tilde{c}_p/\tilde{c}_v$ berechnet. Die Interface-Schallgeschwindigkeit ergibt sich damit zu

$$a_{s,1/2} = \min(\check{a}_L, \check{a}_R) \quad (4.2.12)$$

$$\text{mit } \check{a}_L = \frac{(a_{s,L}^*)^2}{\max(a_{s,L}^*, \tilde{u}_L)} \quad \text{und} \quad \check{a}_R = \frac{(a_{s,R}^*)^2}{\max(a_{s,R}^*, -\tilde{u}_R)}.$$

Mit dieser Art der Berechnung von $a_{s,1/2}$ wird eine exakte Auflösung von stationären Verdichtungsstößen erreicht (Liou (2006) [124]). Gleichung (4.2.11) gilt allerdings nur für perfekte Gase mit $\tilde{\gamma} = \text{konst.}$ Für ideale Gase mit $\tilde{\gamma} = \tilde{\gamma}(\tilde{T}) \neq \text{konst.}$ kann näherungsweise ein integraler, äquivalenter Adiabatenexponenten $\tilde{\gamma}_{\text{eq}}$ verwendet werden (Gerlinger (1995) [56]):

$$\tilde{\gamma}_{\text{eq}} = \frac{\int_0^{\tilde{T}} \tilde{c}_p(\tilde{T}') d\tilde{T}'}{\int_0^{\tilde{T}} \tilde{c}_v(\tilde{T}') d\tilde{T}'} \quad (4.2.13)$$

Für reale Fluide muss die Interface-Schallgeschwindigkeit auf anderem Weg bestimmt werden. Dadurch geht auch die Eigenschaft einer exakten Verdichtungsstoßauflösung verloren, was für Brennkammersimulationen im Unterschall jedoch unerheblich ist. Es können verschiedene Ansätze gewählt werden, z. B. $a_{s,1/2} = 0,5 \cdot (a_{s,L} + a_{s,R})$. Die in dieser Arbeit verwendete Formulierung entspricht der von Edwards et al. (2000) [43], welche in Mehrphasensimulationen eine bessere Auflösung der Phasengrenzen für ihren Ansatz feststellten. Die Interface-Schallgeschwindigkeit wird dann für Simulationen mit realen Fluiden wie folgt berechnet:

$$a_{s,1/2} = \sqrt{\frac{\bar{\rho}_L \tilde{a}_{s,L}^2 + \bar{\rho}_R \tilde{a}_{s,R}^2}{\bar{\rho}_L + \bar{\rho}_R}} \quad (4.2.14)$$

Eine weitere, wichtige Variable im AUSM⁺-up Verfahren ist die charakteristische Machzahl des Problems Ma_∞ aus Glg. (4.2.4). Größere Werte verbessern die Stabilität des Verfahrens, erhöhen jedoch die künstliche Diffusion durch das Diskretisierungsschema. Da für Innenströmungen wie in Brennkammern keine charakteristische Machzahl festgelegt werden kann, wurde stattdessen der entsprechende Wert aus der Präkonditionierung übernommen. Die Verwendung einer ähnlich großen oder kleineren Machzahl Ma_∞ im AUSM⁺-up Verfahren im Vergleich zur Präkonditionierung ist auch essenziell für die Stabilität des Verfahrens, da die Dämpfungsterme M_p und p_u in den Gleichungen (4.2.6) und (4.2.7) sonst nicht mit der gleichen Machzahl skalieren wie die Präkonditionierung.

4.3 Randbedingungen

Zum Aufprägen von Randbedingungen werden in TASCOM3D (Gerlinger (1995) [56], Kindler (2014) [96], Stoll (2001) [208]) sogenannte Geisterzellen (engl.: ghost cells, dummy cells) verwendet (Blazek (2001) [13], Hirsch (2007) [79]). Die Anzahl der dort vorzugebenden und zu extrapolierenden Werte geht aus der Methode der Charakteristiken hervor (Hirsch (2007) [79]).

An Unterschall-Einströmrändern (engl.: inlet, Index in) wurden in dieser Arbeit stets der Massenstrom, die Temperatur sowie die Speziesmassenbrüche und Turbulenzvariablen vorgegeben. Der Druck wird aus dem inneren Strömungsfeld extrapoliert. Für die Turbulenzvariablen wurden folgende Abschätzungsformeln verwendet⁵⁶ (Kindler (2014) [96], Stoll (2001) [208]):

$$\left. \begin{aligned} k_{\text{in}}^{k-\omega} &= \frac{3}{2}(\text{Tu} \cdot u_{\text{in}})^2 \\ \omega_{\text{in}}^{k-\omega} &= \frac{\sqrt{k_{\text{in}}^{k-\omega}}}{L} \end{aligned} \right\} \text{ für } k - \omega \text{ und } k - \omega \text{ SST Modell,} \quad (4.3.1)$$

$$\left. \begin{aligned} q_{\text{in}}^{q-\omega} &= \sqrt{k_{\text{in}}^{k-\omega}} \\ \omega_{\text{in}}^{q-\omega} &= 0,09 \cdot \omega_{\text{in}}^{k-\omega} \end{aligned} \right\} \text{ für } q - \omega \text{ Modell.} \quad (4.3.2)$$

Dabei ist u_{in} die (mittlere) Einströmgeschwindigkeit, Tu der Turbulenzgrad der Einströmung und L ein integrales, turbulentes Längenmaß. Für Rohrströmungen kann $L = 0,038 \cdot d_{\text{h}}$ verwendet werden, wobei d_{h} der hydraulische Durchmesser ist. Für kreisförmige Rohre (z. B. innere O_2 -Zuleitung bei Koaxialinjektoren) entspricht dies dem Durchmesser des Rohres. Für Strömungen durch Hohlzylinder (z. B. H_2 -Zuleitung bei Koaxialinjektoren) entspricht dies der Differenz aus Außen- und Innendurchmesser. Alle weiteren Größen am Einlass ergeben sich als abhängige Variablen. Auf Vorrechnungen zum Aufprägen von Profilen einer ausgebildeten turbulenten Rohrströmung in den Simulationen wurde verzichtet. Stattdessen wurden einfache Blockprofile an Einströmrändern aufgeprägt, welche in ausreichendem Abstand stromauf zum Kerngebiet der Simulation platziert wurden.

An Unterschall-Auslässen wird der statische Druck aufgeprägt und alle anderen Variablen werden extrapoliert. An Überschall-Auslässen werden alle Variablen extrapoliert. Reibungsbehaftete Wände wurden als hydraulisch glatt angenommen. Für adiabate Wände wird der Wandwärmestrom zu Null gesetzt, für vorgegebenen Wandwärmestrom wird dieser entsprechend als Energiefluss aufgeprägt. Bei isothermen Wänden werden die entsprechenden Temperaturen vorgegeben. Des Weiteren wurden Symmetrie-Randbedingungen verwendet, an denen die Null-Gradienten-Bedingung erfüllt wird (Gerlinger (1995) [56], Kindler (2014) [96], Stoll (2001) [208], Versteeg und Malalasekera (2007) [230]).

Es wurden in dieser Arbeit nur reflektierende Randbedingungen verwendet. Modelle für eindi-

⁵⁶ Siehe auch http://www.cfd-online.com/Wiki/Turbulence_length_scale (04. Mai 2016)

mensionale, reibungsfreie, nichtreflektierende Randbedingungen (LODI) finden sich für nicht-reagierende und reagierende ideale Gase in Poinso et al. (1992) [175] sowie Baum et al. (1994) [9]. Erweiterungen für Präkonditionierung und reale Fluide finden sich in Okong'o und Bellan (2012) [162], Hejranfar und Kamali-Moghadam (2012) [72] sowie Li et al. (2012) [118]. Alle Randbedingungen wurden nur explizit in der RHS berücksichtigt. Eine mögliche Methode zur impliziten Behandlung der Randbedingungen in der LHS findet sich in Chen und Zha (2005) [25].

5 Ergebnisse der CFD Simulationen

Die Verifikation und Validierung der Realgasmodelle erfolgte durch Vergleich mit experimentellen Daten aus der Literatur (siehe Kapitel 2). Für die Validierung des im CFD-Code TASCOM3D implementierten Realgasansatzes als Gesamtpaket wurden im Laufe dieser Arbeit vier Testfälle mit unterschiedlicher Komplexität simuliert. Diese sind in Tab. 5.1 übersichtlich dargestellt. In allen Testfällen spielen Realgaseinflüsse aufgrund der hohen Drücke eine wesentliche Rolle. Es wurden jeweils zwei Testfälle mit nichtreagierender und reagierender Strömung simuliert. Dabei wurden überwiegend stationäre, 2D-rotationssymmetrische RANS Simulationen durchgeführt. Diese erlauben aufgrund der relativ kurzen Rechenzeiten umfangreiche Parameterstudien und Sensitivitätsanalysen, um den Einfluss verschiedener Größen auf die Ergebnisse von Simulationen mit überkritischen Bedingungen einschätzen zu können. Für erweiterte Untersuchungen kamen jedoch auch instationäre 2D-URANS Simulationen und 3D-DDES zum Einsatz.

Die Auswahl der Testfälle erfolgte anhand verschiedener Kriterien. Zum einen wurde der praxisrelevante Bezug zur Simulation von Strömungen in Raketenbrennkammern wie der turbulente Strahlzerfall und Wandwärmeübergang bei hohen (überkritischen) Drücken berücksichtigt. Zum anderen spielten Faktoren wie die Verfügbarkeit experimenteller Vergleichsdaten, bisherige numerische Simulationen aus der Literatur sowie die benötigten Rechenressourcen eine wichtige Rolle. In den folgenden Abschnitten 5.1 - 5.4 werden die simulierten Testfälle zusammen mit den in dieser Arbeit erzielten Ergebnissen vorgestellt. Alle Rechnungen wurden am Höchstleistungsrechenzentrum in Stuttgart (HLRS) durchgeführt. Der verwendete CFD-Code TASCOM3D löst die in Kapitel 3 beschriebenen turbulenten, reaktiven Strö-

Tabelle 5.1: Übersicht über die simulierten Testfälle.

Testfall	Nominaldruck (bar)	Spezies (am Einlass)	Verbrennung	(in)stationäre Simulationen
N ₂ -Strahl	40	N ₂	nein	beides
CO ₂ -Rohr	90	CO ₂	nein	stationär
Mascotte A-60	60 - 70	H ₂ ⁽ⁿ⁾ , O ₂	ja	stationär
BKC	60 - 63	H ₂ ^(p) , O ₂	ja	beides

nungsgleichungen. Die Randbedingungen wurden in allen Simulationen wie in Abschnitt 4.3 beschrieben aufgeprägt.

5.1 Transkritischer N_2 -Strahl

Als erster Testfall mit inerter Strömung wird in dieser Arbeit der turbulente Strahlzerfall eines kryogenen N_2 -Strahls in einer warmen N_2 -Umgebung bei Raumtemperatur untersucht. Experimente hierzu wurden von der Gruppe von Mayer am DLR in Lampoldshausen (Mayer et al. (1998) [134], Mayer et al. (2003) [133], Branam und Mayer (2002, 2003) [15, 16]) sowie von Chehroudi am Air Force Research Laboratory in den USA (Chehroudi et al. (2000) [21], Chehroudi et al. (2002) [22], Chehroudi et al. (2002) [20]) durchgeführt. Ein typisches Schattengraphbild bei transkritischer Einspritzung wurde bereits in der Einleitung in Abb. 1.2(b) präsentiert. Der turbulente Strahlzerfall ist aufgrund der fehlenden Oberflächenspannung und Verdampfungsenthalpie stark turbulenzdominiert. Zusätzlich spielt die Diffusion von Wärme eine weitere, wichtige Rolle.

In dieser Arbeit wird der Testfall Nr. 5 aus Branam und Mayer (2003) [16] bzw. Nr. 3 aus Mayer et al. (2003) [133] simuliert. Dieser wurde auch beim „2nd International Workshop on Rocket Combustion Modeling“ (2001), hier mit IWRCM-2 abgekürzt, als Validierungstestfall RCM1A vorgestellt (Telaar et al. (2001) [213]). In der Literatur finden sich außerdem für diesen und weitere Betriebspunkte zahlreiche numerische Untersuchungen mittels RANS Simulationen (Branam et al. (2001) [17], Farmer et al. (2001) [47], Blouquin und Lequette (2001) [14], Banuti und Hannemann (2010) [6], Kim et al. (2011) [95], Park (2012) [165]), LES (Schmitt et al. (2010) [190], Park (2012) [165], Hickey und Ihme (2013) [78], Petit et al. (2013) [169], Müller et al. (2016) [152]) und 2D-DNS (Terashima und Koshi (2013) [214]).

5.1.1 Testfallbeschreibung

Abbildung 5.1 zeigt das simulierte Gebiet zum RCM1A Testfall. Die geometrischen und operativen Eckdaten dazu finden sich zusammengefasst in Tab. 5.2. Kryogenes N_2 strömt bei einer Temperatur von 120,9 K durch den Injektor (Durchmesser am Auslass $d = 2,2$ mm) in eine bedruckte, zylindrische Kammer bei 39,7 bar. Die Kammer mit einer Länge von 1000 mm und einem Durchmesser von 122 mm ist nach hinten offen, so dass warmes N_2 aus dem umliegenden Behälter bei Raumtemperatur (298,15 K) in die Kammer ein- und mit dem aufgeheizten, kryogenen N_2 -Strahl wieder ausströmt. Der Massenstrom des kryogenen N_2 -Strahls ist mit 9,95 g/s angegeben.

Die Temperaturmessungen fanden mittels Thermoelementen statt, welche einen Durchmesser von 1 mm haben (Branam und Mayer (2003) [16], Mayer et al. (2003) [133]). Die Messposition im Injektor mit der Temperatur $T_1 = 120,9$ K ist in Abb. 5.1 gekennzeichnet. Aufgrund von

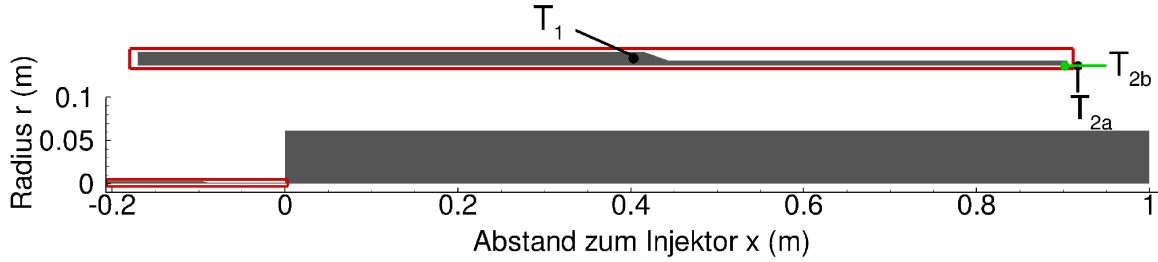


Abbildung 5.1: Simuliertes Gebiet und Positionen für die Temperaturmessungen für den „N₂-Strahl“ Testfall.

Wärmeleitung an den Injektorwänden erwärmt sich das kryogene N₂ im Injektor vor allem in Wandnähe in unbekannter Weise. Aus diesem Grund wurden im Experiment in separaten Versuchen die Temperaturen am Injektorausstritt gemessen. Dabei wurde das Thermoelement einmal senkrecht zur Hauptströmung ($T_{2a} = 126,9$ K) gehalten und einmal parallel auf der Symmetrieachse ca. 1 mm in den Injektor eingeführt ($T_{2b} = 122,9$ K). Im ersten Fall wird die Strömung stark gestört, so dass die Spitze des Thermoelements vermutlich nicht komplett mit dem kryogenen N₂-Strahl benetzt ist und stattdessen teilweise warmes N₂ aus der Umgebung zur Messposition eindringt. Im zweiten Fall wird dies umgangen, jedoch sollte die Temperatur zur Wand hin aufgrund der Wärmeleitung im Injektor größer sein. Die Temperaturen T_{2a} und T_{2b} werden von Branam und Mayer (2003) [16] deshalb als obere und untere Temperaturgrenze angesehen.

Wie aus Abb. 5.2(a) deutlich hervorgeht, führen bei den gegebenen Testbedingungen wegen der stark nichtlinearen Thermodynamik schon sehr geringe Temperaturunterschiede zu großen Änderungen in der Dichte. Eine Temperaturerhöhung um 10 K von 120 K auf 130 K reduziert die Dichte ca. um einen Faktor zwei. Auch die benötigte Wärmemenge zum Aufheizen des kryogenen N₂-Strahls variiert stark durch das extrem nichtlineare Verhalten in der Wärmekapazität (Abb. 5.2(b)). Das Modell eines idealen Gases zeigt im Vergleich deutlich weniger ausgeprägte Variationen in der Dichte (Abb. 5.2(a)) und eine nahezu konstante Wärmekapazität (Abb. 5.2(b)) im betrachteten Temperaturbereich. Die SRK Zustandsgleichung kann den Verlauf der REFPROP Korrelationen sehr gut wiedergeben. Bei sehr niedrigen Temperaturen ergeben sich jedoch Abweichungen bis ca. 10 % in der Dichte. Durch die Verwendung einer Volumenkorrektur ($c = +7,0 \cdot 10^{-6}$ m³/mol) kann mit der SRKmVK Zustandsgleichung die Übereinstimmung mit REFPROP Daten in den gewünschten Teilbereichen ($T \gtrsim 120$ K), welche für diesen Testfall relevant sind, verbessert werden⁵⁷. Für die Wärmekapazität ergibt sich kein Unterschied in Abhängigkeit der Temperatur⁵⁸.

Für die Validierung der CFD-Simulationen stehen axiale Dichteprofile auf der Symmetrieachse sowie radiale Dichteprofile bei $x/d = 1,2$, $x/d = 5,0$ und $x/d = 25,0$ zur Verfügung,

⁵⁷ In anderen Teilbereichen kann es dabei zu einer Verschlechterung bei der Vorhersage der Dichte kommen, so dass darauf zu achten ist, dass dies keinen negativen Einfluss auf die entsprechende Simulation hat.

⁵⁸ Wird die Wärmekapazität gegen die Dichte aufgetragen, so ist die Kurve mit Volumenkorrektur gegenüber der Kurve ohne Volumenkorrektur um den Wert des Parameters c verschoben.

Tabelle 5.2: Geometrische und operative Details für den „N₂-Strahl“ Testfall.

Geometrische Details	
Länge der bedruckten Kammer (mm)	1 000,0
Durchmesser der bedruckten Kammer (mm)	122,0
Injektordurchmesser am Auslass (mm)	2,2
Operative Details	
nomineller Kammerdruck (bar)	39,7
Einspritztemperatur (K)	120,9 ... 126,9
Massenstrom (g/s)	9,95
mittlere Geschwindigkeit am Injektoraustritt (m/s)	≈ 5

welche mittels Raman-Spektroskopie gemessen wurden. Diese ist insbesondere in Bereichen sehr hoher Dichten und Dichtegradienten mit stärkeren Fehlern belastet (Branam und Mayer (2003) [16]). Die gemessenen Dichten auf der Mittelachse sind in Abb. 5.4(a) dargestellt. Die erwarteten Dichtebereiche für den Temperaturbereich $T_1 \dots T_{2a} = 120,9 \text{ K} \dots 126,9 \text{ K}$ aus REFPROP sowie für die SRK Zustandsgleichung sind ebenfalls dargestellt. Offenkundig sind die gemessenen Temperaturen und Dichten bedingt durch Messfehler nicht konsistent zueinander. Die mit der SRK Zustandsgleichung berechnete Dichte stimmt für eine Temperatur von $T_{2a} = 126,9 \text{ K}$ sehr gut mit der gemessenen Dichte in der Nähe des Injektoraustritts überein.

5.1.2 Numerisches Setup

Es wurden sowohl stationäre 2D-achsensymmetrische RANS Simulationen als auch instationäre 3D-DDES durchgeführt. Die verwendeten Rechengitter besitzen in etwa 95 000 2D-Volumen bzw. 8 000 000 3D-Volumen und sind zu den Injektor- und Faceplatewänden hin stark verfeinert⁵⁹. Die wandnächsten Zellen besitzen in wandnormaler Richtung eine Höhe von 1 μm . Der maximale dimensionslose Wandabstand wird so in der Referenzsimulation mit $y^+ = 1,7$ am Injektoraustritt erreicht.

Für die 2D-Simulationen wurde der Injektor mit 64 Zellen in radialer Richtung sehr fein aufgelöst. Für die restliche Kammerhöhe wurden ebenfalls 64 Zellen verwendet. Die Kammerlänge wurde mit 631 Elementen in axialer Richtung diskretisiert, wobei zur Injektorregion hin stark

⁵⁹ Für das 3D-Gitter wurde im Gegensatz zum 2D-Gitter die Kammerwand nur grob aufgelöst.

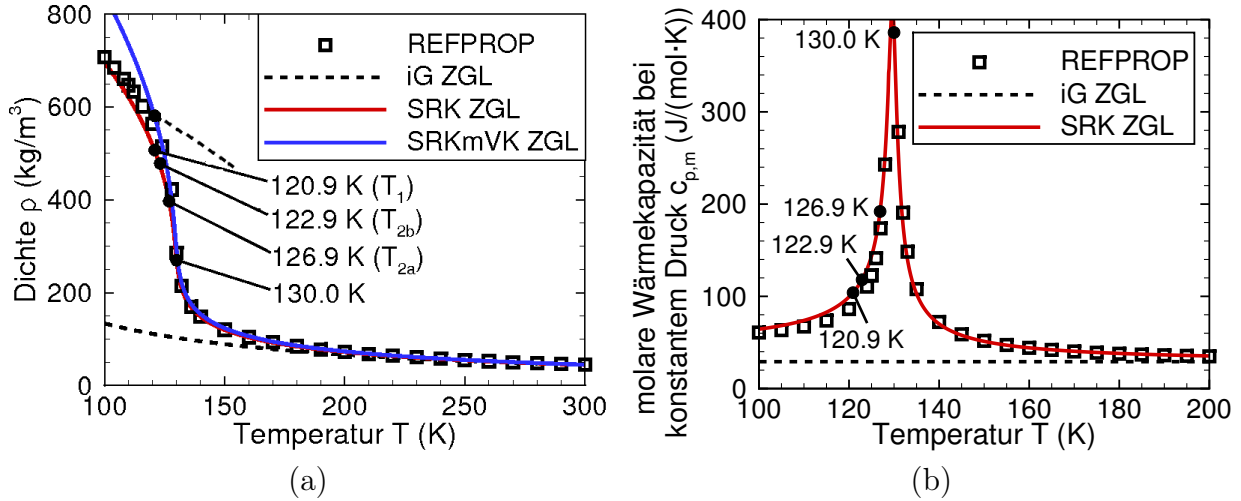


Abbildung 5.2: Dichte (a) und molare Wärmekapazität bei konstantem Druck (b) von N_2 bei 39,7 bar in Abhängigkeit der Temperatur berechnet mit der idealen Gasgleichung, der SRK Zustandsgleichung, der SRKmVK Zustandsgleichung (nur für die Dichte) und REFPROP.

verfeinert wurde. Gitterunabhängigkeit wurde in 2D durch den Vergleich mit Simulationen auf einem axial und radial verfeinerten Gitter mit ca. 285 000 Elementen sichergestellt.

Im 3D-Gitter wurde der Injektor mit einem strukturierten O-Grid und 45 Zellen über den Injektorradius diskretisiert. In axialer Richtung wurden für die Kammer ca. 540 Zellen verwendet mit starker Verfeinerung hin zum Injektor. Die Umfangsrichtung wurde mit 120 Zellen aufgelöst. Der physikalische Zeitschritt in der instationären DDES ist 10^{-6} s. Konvergenz in den inneren Iterationen um drei Größenordnungen bezüglich des globalen Dichteresiduums wurde mit einer CFL-Zahl von 1,0 in 12 bis 14 inneren Iterationen erreicht. Der Mittelungszeitraum beträgt mindestens 0,1 s, was in etwa drei Durchlaufzeiten im Bereich $x/d < 40$ entspricht. Für die DDES wurde zudem das MLP^{ld}-Verfahren mit einer Diskretisierung fünfter Ordnung für die reibungsfreien Flüsse eingesetzt.

Nach den Empfehlungen des IWRCM-2 (Telaar et al. (2001) [213]) werden der Injektor sowie die Stirnseite der Kammer als adiabatisch angenommen, während die zylindrische Kammerwand als isotherm mit einer Wandtemperatur von $T_w = 297$ K beaufschlagt wird. Die Injektorwände werden als hydraulisch glatt beschrieben und ebenso modelliert. Am Injektoreinlass wurde ein Blockprofil aufgeprägt. Der Injektor wurde künstlich verlängert, so dass sich ein voll entwickeltes, turbulentes Strömungsfeld am Injektorausstritt einstellt. Dieses Vorgehen wurde auch bei den weiteren Testfällen angewandt. Alle 2D-Rechnungen wurden auf 24 CPUs durchgeführt, alle 3D-Rechnungen auf 2608 CPUs.

Um die Sensitivität der Simulation auf verschiedene Einflussgrößen beurteilen zu können, wurde eine umfangreiche Parametervariation in 2D durchgeführt. Die Einstellungen der 2D-Referenzsimulation mit den untersuchten Parametern sind in Tab. 5.3 zusammengestellt. Als erstes werden nun die Ergebnisse der 2D-RANS Simulationen präsentiert (Abschnitt 5.1.3), bevor im Anschluss auf die 3D-DDES Resultate eingegangen wird (Abschnitt 5.1.4).

Tabelle 5.3: Einstellungen der 2D-Referenzsimulation für den „N₂-Strahl“ Testfall.

Eintrittstemperatur im Injektor (K)	120,9
Modellierung der Injektorwände	adiabat
Turbulenzmodell	$q - \omega$
turbulente Prandtlzahl	0,9
Polynomrekonstruktion / Limiter	2. Ordnung MLP ^{ld}
Zustandsgleichung	SRK

5.1.3 2D-RANS Simulationsergebnisse

Dichtekonturen und Temperaturkonturen überlagert mit Stromlinien für die Referenzsimulation, wie sie typisch sind für RANS Simulationen des „N₂-Strahl“ Testfalls, sind in Abb. 5.3 dargestellt. Der kryogene N₂-Strahl zerfällt durch turbulente Mischung mit der äußeren, warmen N₂-Umgebung. In den RANS Simulationen werden die instationären, turbulenten Wirbel vollständig durch die turbulente Diffusion mittels der sehr hohen turbulenten Viskosität modelliert, welche die laminare Viskosität gebietsweise um weit mehr als den Faktor 100 überschreitet (hier nicht dargestellt). Die stark dämpfende turbulente Viskosität verhindert auch auf wesentlich feineren Gittern und bei Verwendung einer Diskretisierung fünfter Ordnung für die reibungsfreien Flüsse die Ausbildung eines instationären Strömungsfeldes, wie es im Experiment beobachtet wird. Für eine Abbildung der instationären Vorgänge kommen URANS Simulationen deshalb nicht in Betracht. Stattdessen müssen LES-Techniken zur Anwendung kommen, in denen die turbulente Viskosität wesentlich niedriger ist (siehe Abschnitt 5.1.4).

Wie in Abschnitt 5.1.1 besprochen wurde, reagieren unter anderem die Dichte und die spezifische Wärmekapazität bei konstantem Druck bei den gegebenen Injektionsbedingungen sehr sensitiv auf geringe Änderungen der Temperatur. Dies spiegelt sich entsprechend auch in den Dichte- und Temperaturkonturen in Abb. 5.3 wider. Der Dichtegradient in der Scherschicht ist sehr hoch. Während sich die Temperatur auf der Achse bis $x \approx 0,045$ m lediglich um etwa 9 K durch die Vermischung mit der warmen N₂-Umgebung erhöht, hat sich die Dichte des kryogenen N₂-Strahls bereits halbiert.

Ein Vergleich simulierter und gemessener axialer Dichteprofile entlang der Symmetrieachse ist in Abb. 5.4 gegeben. In Abb. 5.4(a) sind zusätzlich, wie bereits in Abschnitt 5.1.1 besprochen, die erwarteten Dichtebereiche aus dem Experiment und der Simulation gegeben, die sich durch die Unsicherheiten in den Einspritztemperaturen ergeben. Weiterhin zeigt Abb. 5.4(a) die simulierten Dichteprofile bei Variation der Einspritztemperatur unter Verwendung adiabater und isothermer Injektorwände. Für die isothermen Wände wurde ein lineares Temperaturprofil aufgeprägt (Einspritztemperatur am Einlass, Raumtemperatur am

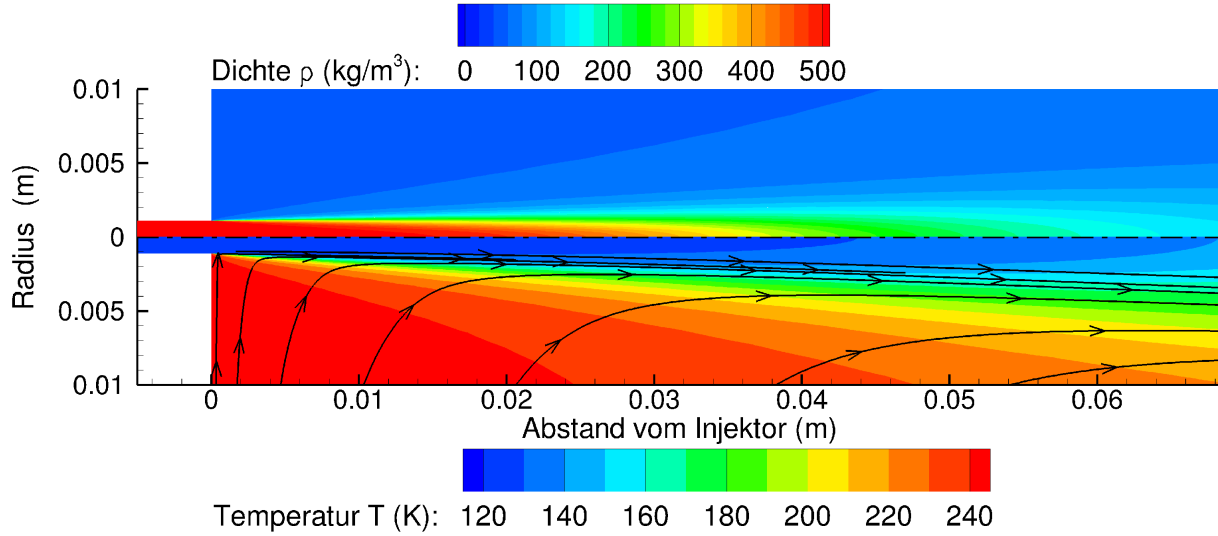


Abbildung 5.3: Dichte- und mit Stromlinien überlagerte Temperaturkonturen der Referenzsimulation für den „ N_2 -Strahl“ Testfall.

Injektorende).

Zunächst werden die Simulationen mit adiabaten Wänden diskutiert. Bei einer vorgegebenen Temperatur am Injektoreintritt von $T_{\text{Inj}} = T_1 = 120,9 \text{ K}$ und $T_{\text{Inj}} = T_{2b} = 122,9 \text{ K}$ wird die Dichte gegenüber den experimentellen Messwerten deutlich überschätzt. Für eine Einspritztemperatur von $T_{\text{Inj}} = T_{2a} = 126,9 \text{ K}$ stimmt die berechnete Dichte am Injektoraustritt sehr gut mit der gemessenen Dichte im dichten N_2 -Strahl überein. Die Dichteverläufe der Simulationen und des Experiments sind bis auf den Offset in der Dichte sehr ähnlich. Bis $x \approx 10 \text{ mm}$ bleibt der kryogene N_2 -Strahl auf der Achse erhalten und die Dichte in etwa konstant. Weiter stromab vermischt sich zunehmend warmes N_2 aus der Umgebung mit dem kalten N_2 -Strahl. Zusätzlich gelangt Wärme durch (turbulente) Diffusion zur Achse. Der Dichteabfall in den Simulationen ist schwächer als im Experiment, so dass die Länge des kalten N_2 -Strahls (engl.: dark core length) etwas überschätzt wird.

In weiteren Simulationen wurde der Einfluss von Wärmeleitung in den Injektorwänden mittels isothermer Wände untersucht (für $T_{\text{Inj}} = 120,9 \text{ K}$ und $T_{\text{Inj}} = 122,9 \text{ K}$). Durch den Wärmeeintrag im Injektor kommt es zu einer Stratifizierung der Temperatur über den Injektorradius. Die niedrigsten Temperaturen und damit die höchsten Dichten finden sich auf der Mittelachse. Jedoch zeigt sich auch hier schon ein Effekt am Injektoraustritt und die Dichten liegen unterhalb derer in den Simulationen mit adiabaten Injektorwänden. Im Gegensatz zu den vorherigen Simulationen und zum Experiment ist hier schon zu Beginn ein leichter Abfall in der Dichte auf der Symmetrieachse zu beobachten. Im weiteren Verlauf ergibt sich jedoch ein ähnliches Verhalten und keine bessere Übereinstimmung mit dem Experiment, so dass die Annahme adiabater Wände eine gute Approximation darstellt.

Wesentliche Unterschiede zeigen sich bei Verwendung unterschiedlicher Turbulenzmodelle und teilweise auch bei der Wahl verschiedener turbulenter Prandtlzahlen. Die Einspritz-

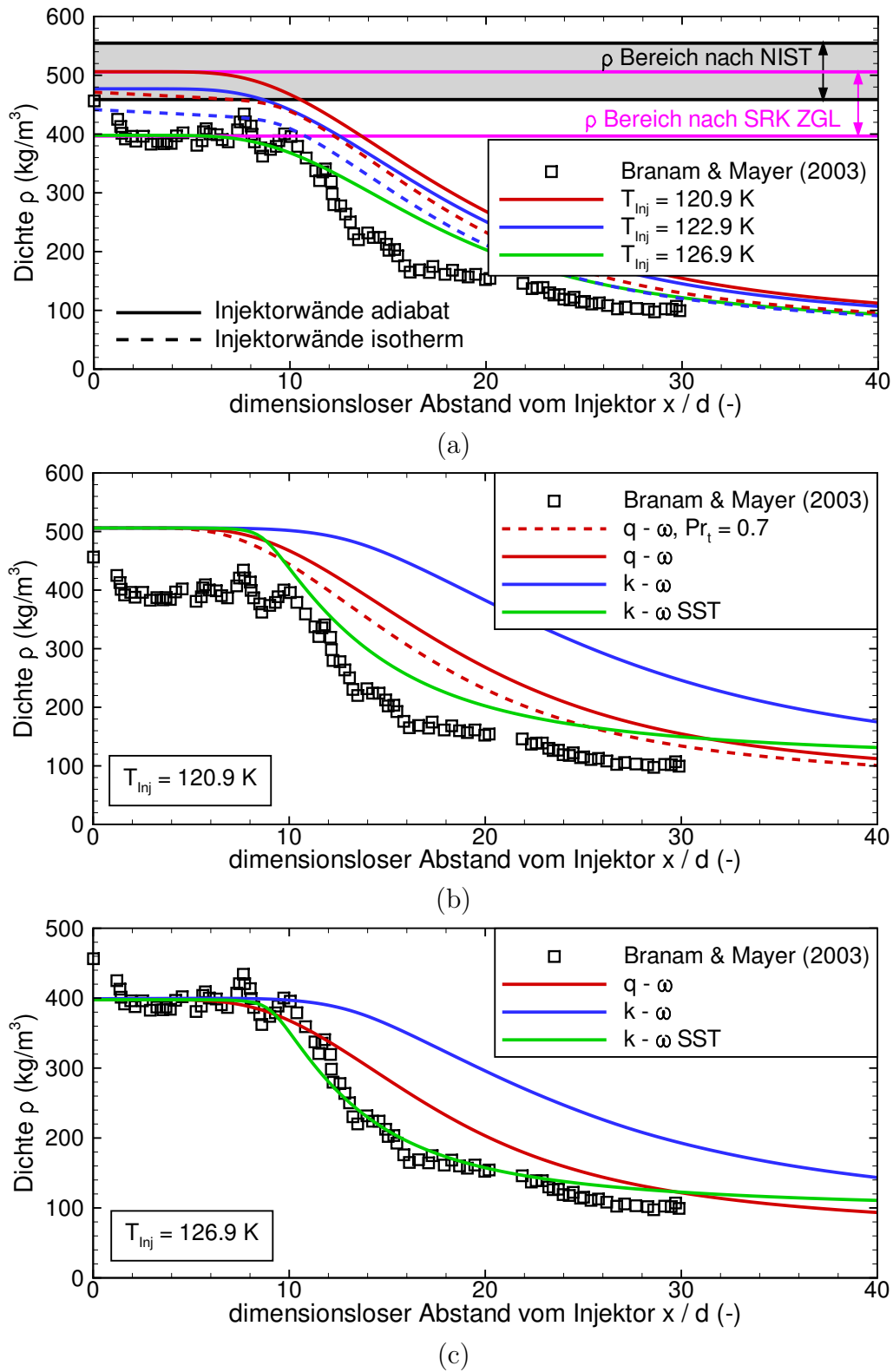


Abbildung 5.4: Vergleich mit RANS berechneter und gemessener Dichteprofile entlang der Symmetrieachse für den „N₂-Strahl“ Testfall: Variation der Einspritztemperatur und der Injektorwandmodellierung (a) sowie des Turbulenzmodells (und der turbulenten Prandtlzahl) bei $T_{inj} = 120,9$ K (b) und $T_{inj} = 126,9$ K (c).

temperatur der Referenzsimulation von $T_{\text{Inj}} = 120,9$ K wurde zunächst beibehalten (siehe Abb. 5.4(b)) und in weiteren Simulationen mit $T_{\text{Inj}} = 126,9$ K auf die gemessene Dichte am Injektorausstritt angepasst (siehe Abb. 5.4(c)). Im Gegensatz zur Referenzsimulation mit dem q - ω Modell und einer turbulenten Prandtlzahl von 0,9 bleibt der kalte N₂-Strahl auf der Achse vor allem mit dem k - ω , aber auch merklich mit dem k - ω SST Turbulenzmodell länger erhalten. Während in der k - ω Simulation der turbulente Strahlzerfall auch weiter stromab wesentlich langsamer vonstattengeht, ergibt sich mit dem k - ω SST Modell ein viel stärkerer Abfall in der Dichte. Dieser stimmt qualitativ besser mit dem experimentell ermittelten Dichteprofil überein. Eine Verringerung der turbulenten Prandtlzahl führt durch den erhöhten turbulenten Wärmeeintrag zu einem etwas stärkeren Abfall in der Dichte. Der Einfluss ist jedoch deutlich geringer als der Effekt unterschiedlicher Turbulenzmodelle. Mit angepasster Einspritztemperatur ergeben sich ähnliche Trends. Eine sehr gute Übereinstimmung mit dem Experiment wird mit dem k - ω SST Modell erzielt, während das q - ω Modell und vor allem das k - ω Modell einen wesentlich flacheren Abfall in der Dichte prognostizieren.

Im Zuge der Sensitivitätsanalyse wurden weiterhin die Realgasmodellierung durch die Zustandsgleichung und die Stoffwertberechnung untersucht (hier nicht bildhaft dargestellt). Als erstes wurde dafür eine Simulation mit der SRKmVK Zustandsgleichung durchgeführt. Die Volumenverschiebung von $c = +7,0 \cdot 10^{-6}$ m³/mol wurde so angepasst, dass sich im relevanten Temperaturbereich eine sehr gute Übereinstimmung der Dichte mit REFPROP Daten ergibt (siehe Abb. 5.2(a)). Die Einlasstemperatur wurde auf 124,4 K gesetzt, so dass sich eine Dichte sehr ähnlich zur Referenzsimulation ergibt. Ein Vergleich zwischen dieser Rechnung und der Referenzsimulation lieferte nur marginale Unterschiede zwischen beiden Lösungen. Als zweites wurde eine Simulation durchgeführt, welche lediglich die Viskositäten und Wärmeleitfähigkeiten für ideale Gase verwendet. Auch hier ergaben sich nur sehr geringfügige Differenzen im Vergleich zur Referenzsimulation. Dies ist nicht weiter verwunderlich, da die Strömung wie bereits erwähnt sehr stark turbulenzdominiert ist und die turbulenten Viskositäten und Wärmeleitfähigkeiten dominant gegenüber ihren laminaren Gegenstücken sind.

Obwohl mit der k - ω SST Simulation der axiale Dichteverlauf sehr gut getroffen wird, zeigen sich gerade hier stärkere Diskrepanzen in den radialen Dichteprofilen gegenüber zum Experiment. Diese sind für alle drei Simulationen aus Abb. 5.4(c) mit Variation des Turbulenzmodells bei einer Einspritztemperatur von $T_{\text{Inj}} = 126,9$ K an den axialen Positionen $x/d = 5,0$ und $x/d = 25,0$ in Abbildungen 5.5(a) und 5.5(b) aufgetragen. Die q - ω Simulation sagt außerhalb der Scherschicht die Mischungstemperatur und damit die Dichte in der Kammer, welche sich aus rezirkulierendem, erwärmten N₂ und vom Kammerende einströmendem N₂ zusammensetzt, korrekt voraus. Dies gilt auch für eine Einspritztemperatur von $T_{\text{Inj}} = 120,9$ K, obwohl sich die berechneten und gemessenen Dichten auf der Achse in diesem Fall stark unterscheiden (hier nicht dargestellt). Die k - ω und k - ω SST Simulationen hingegen sagen eine zu hohe Rezirkulationsmenge des kryogenen N₂-Strahls voraus, so dass sich in der Kammer eine zu niedrige Temperatur und damit eine zu hohe Dichte einstellt.

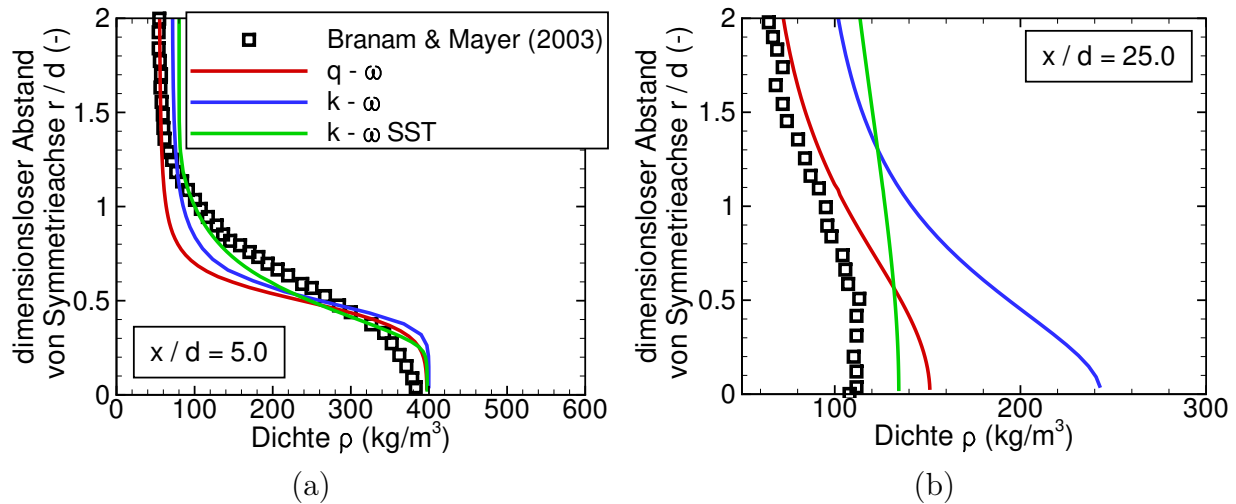


Abbildung 5.5: Vergleich mit RANS berechneter und gemessener radialer Dichteprofile bei $x/d = 5,0$ und $x/d = 25,0$ für den „N₂-Strahl“ Testfall.

Während die radiale Durchmischung hier mit den $k-\omega$ basierten Turbulenzmodellen stärker erscheint, wurde in Simulationen mit Verbrennung (Abschnitt 5.3 und 5.4) ein gegenteiliger Effekt beobachtet.

Eine gleichzeitig gute Wiedergabe der axialen und radialen Dichteprofile konnte in den RANS Simulationen dieser Arbeit nicht erzielt werden. Park (2012) [165] präsentiert radiale Dichteprofile für einen ähnlichen Betriebspunkt bei 60 bar und einer Einspritztemperatur von 128,7 K. Dabei wurde der Einfluss verschiedener Zustandsgleichungen und Zweigleichungsturbulenzmodelle untersucht. Es ergaben sich vergleichbare Unterschiede zum Experiment wie in den in dieser Arbeit gezeigten Ergebnissen. Nach Auskunft von G. Ribert⁶⁰ kann auch mit LES keine gleichzeitig gute Übereinstimmung für die axialen und radialen Dichteprofile erreicht werden. Da in Veröffentlichungen zu Simulationen mit RANS oder LES zu diesem und ähnlichen Testfällen zumeist nur Vergleiche der axialen Dichteprofile präsentiert werden, kann an dieser Stelle nur vermutet werden, dass die Ergebnisse für die radialen Profile auch mit anderen CFD-Codes keine zufriedenstellende Übereinstimmung lieferten.

5.1.4 3D-DDES Simulationsergebnisse

In den stationären RANS Simulationen werden alle turbulenten Schwankungen vollständig modelliert. Mittels instationärer URANS Simulationen können in manchen Fällen zumindest die grobskaligen, hydrodynamischen Instabilitäten abgebildet werden (Lempke et al. (2015) [116]). Im hier untersuchten Testfall wird dies selbst beim Einsatz sehr feiner Gitter und Diskretisierungstechniken hoher Ordnung durch die hohe und stark dämpfende turbulente Viskosität verhindert und das simulierte Strömungsfeld bleibt stationär. Um das im Experiment beobachtete, instationäre Verhalten und einen Großteil der turbulenten Schwan-

⁶⁰ Private Kommunikation.

Tabelle 5.4: Einstellungen der DDES Simulationen und der $k-\omega$ SST RANS Vergleichssimulation für den „ N_2 -Strahl“ Testfall.

	$k-\omega$ SST	DDES-1	DDES-2	DDES-3
Einspritztemperatur (K)	126,9	126,9	126,9	122,9
Einspritzdichte (kg/m^3)	396	396	396	541
Zustandsgleichung	SRK	SRK	SRK	SRKmVK
Konstante C_{DDES}	-	0,5	0,6	0,5

kungen zeitlich wiedergeben zu können, müssen LES-Techniken herangezogen werden, in welchen die turbulente Viskosität in der Kernströmung reduziert wird. In dieser Arbeit wird dazu die in Abschnitt 3.2.2 beschriebene DDES als hybrides URANS/LES-Verfahren verwendet. Es wurden drei verschiedene DDES durchgeführt, deren Unterschiede in Tab. 5.4 zusammen mit den Einstellungen der $k-\omega$ SST RANS Vergleichssimulation aus Abb. 5.4(c) aufgelistet sind. Zum einen wurde der Einfluss der Konstante C_{DDES} zwischen den Simulationen DDES-1 und DDES-2 untersucht. Zum anderen wurde der Einfluss der Einspritzdichte und -temperatur in Kombination mit einer Volumenkorrektur in der Zustandsgleichung zwischen den Simulationen DDES-1 und DDES-3 analysiert.

Abbildung 5.6 zeigt für den Fall DDES-3 instantane Bilder des Verhältnisses von turbulenter zu laminarer Viskosität μ_t/μ und des räumlichen Dichtegradienten als numerisches Schlierenbild in einem Schnitt durch die Kammer sowie eine Isokontur der Dichte bei $400 \text{ kg}/\text{m}^3$ gefärbt mit dem räumlichen Dichtegradienten. Da der Injektor in der DDES wie in den RANS Simulationen axial nur sehr grob aufgelöst wurde, ist das entsprechende Gitter dort nicht LES geeignet und die DDES verbleibt im Injektor im URANS-Modus. Entsprechend hoch ist das μ_t/μ -Verhältnis dort mit Werten bis 250 (Abb. 5.6(a)). Stromab der URANS-Zone nimmt das μ_t/μ -Verhältnis im Strahl schnell auf LES-typische Werte im Bereich 10 bis 30 ab (Spalart et al (2006) [204], Shur et al. (2008) [196]). Weiter stromab steigen die Werte aufgrund einer axial größeren Gitterauflösung wieder leicht an.

Die Bilder der Dichtegradienten (Abbildungen 5.6(b) und 5.6(c)) verdeutlichen, dass sich kurz nach dem Injektoraustritt näherungsweise rotationssymmetrische Wirbelstrukturen bilden (durch Pfeile gekennzeichnet), welche weiter stromab schließlich chaotisch und dreidimensional zerfallen. Diese werden auch in LES von Schmitt et al. (2010) [190] und Petit et al. (2013) [169] bestätigt, während Park (2012) [165] dies nur für den unphysikalischen Einsatz der Idealgaszustandsgleichung, aber nicht für die SRK Zustandsgleichung feststellt. Die turbulenten Wirbelstrukturen sind in der DDES im Vergleich zum Experiment von Branam und Mayer (2003) [16] grobskaliger, jedoch ähnlich zu LES von Schmitt et al. (2010) [190], Park (2012) [165], Petit et al. (2013) [169] und Müller et al. [152].

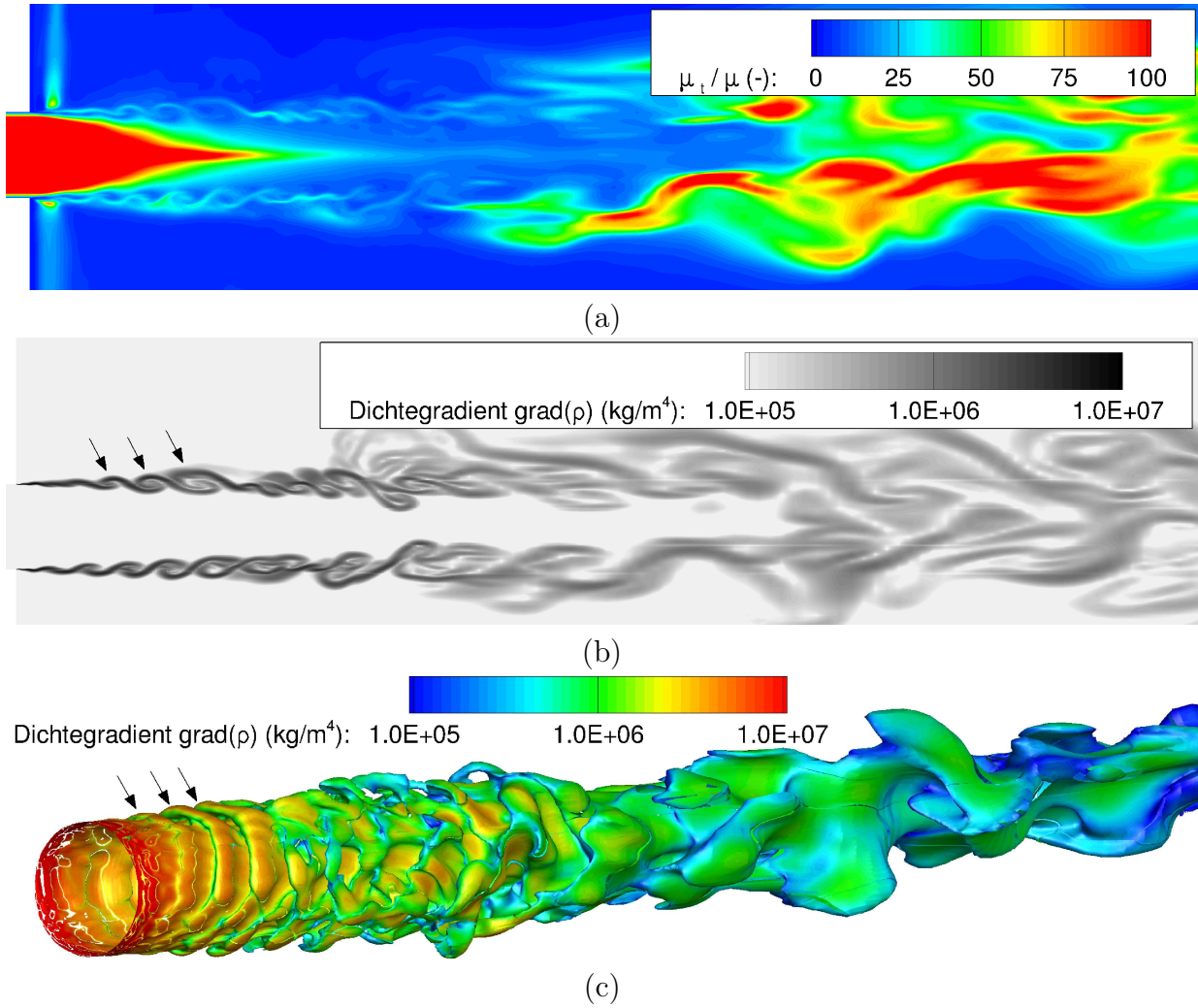


Abbildung 5.6: Verhältnis μ_t/μ (a) und räumliche Dichtegradienten (Schlierenbild) (b) in einem Schnitt durch die Kammer sowie Isokontur der Dichte bei 400 kg/m^3 gefärbt mit dem räumlichen Dichtegradienten (c) in der DDES-3 Simulation für den „N₂-Strahl“ Testfall.

Neben dem μ_t/μ -Verhältnis ist auch das aufgelöste Energiespektrum der turbulenten Geschwindigkeitsschwankungen ein wichtiges Kriterium für die Güte einer LES bzw. DDES. Abbildung 5.7 zeigt für die Simulation DDES-3 das Energiespektrum der Geschwindigkeitsfluktuationen $E_k = 0,5 (\tilde{u}_i - \langle \tilde{u}_i \rangle)(\tilde{u}_i - \langle \tilde{u}_i \rangle)$ als Funktion der Frequenz in einem Punkt in der Scherschicht nahe des Injektors⁶¹. Werte in $\langle \dots \rangle$ stellen zeitliche Mittel über die simulierte Mittelungszeit dar. Das Energiespektrum ergibt sich aus einer Fast Fourier Transformation (FFT) des zeitechten Signals. In doppellogarithmischer Darstellung ergibt sich zu höheren Frequenzen (kleinere Wirbel mit höherer Wirbelfrequenz) der für die Energiekaskade typische Abfall nach der Theorie von Kolmogorov mit einer Steigung von $-5/3$ (Pope (2000) [177]).

Die Dichteprofile der RANS Vergleichssimulation und der zeitlich (und in Umfangsrichtung) gemittelten DDES Rechnungen entlang der Mittellinie sowie in radialer Richtung bei $x/d = 5$

⁶¹ Für die Frequenz der turbulenten Geschwindigkeitsschwankungen wird angenommen, dass diese mit der Wirbelgröße und der Wellenzahl bzw. turbulenten Wirbelfrequenz korreliert.

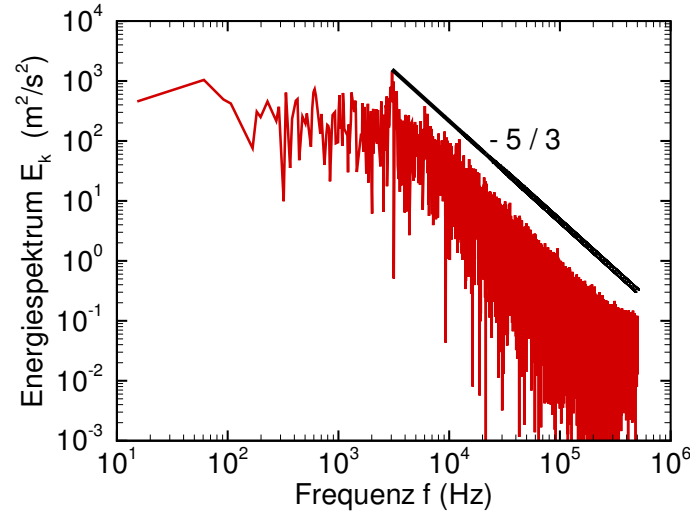


Abbildung 5.7: Spektrum der turbulenten kinetischen Energie in der Scherschicht in Abhängigkeit der Frequenz mit typischem $5/3$ - Abfall für die DDES-3 Simulation des „ N_2 -Strahl“ Testfalls.

und $x/d = 25$ sind in Abbildungen 5.8 und 5.9 aufgetragen. Um die Profile vergleichbarer zu machen und Unsicherheiten in den Einspritztemperaturen und -dichten auszugleichen, wurden die Dichteprofile mit dem minimalen und maximalen Wert normiert. Generell lässt sich feststellen, dass die Qualität der DDES-Lösungen gut mit dem Experiment übereinstimmt und vergleichbar mit der RANS Vergleichslösung ist, welche auf dem $k-\omega$ SST Modell basiert. An dieser Stelle soll betont werden, dass die DDES-Lösungen ohne weitere Anpassungen erzielt wurden. Die RANS Lösungen hingegen hängen stark vom verwendeten Turbulenzmodell (und zum Teil auch der turbulenten Prandtlzahl ab) und liefern teilweise deutlich schlechtere Ergebnisse (siehe Abschnitt 5.1.3). In nichtnormierter Darstellung (hier nicht abgebildet) wird die Dichte auf der Achse bei $x/d=30$ für die DDES-1 und DDES-2 Rechnung mit ca. 145 kg/m^3 etwas höher als im Experiment und der $k-\omega$ SST Vergleichslösung mit ca. 125 kg/m^3 vorhergesagt.

Die Konstante C_{DDES} im DDES-Modell (siehe Abschnitt 3.2.2) muss in der Regel für jedes numerische Verfahren anhand einer Simulation einer abklingenden, homogenen, isotropen Turbulenz bestimmt werden (Kindler (2014) [96]). Da die im „ N_2 -Strahl“ Testfall vorkommenden, hohen Dichtegradienten und entsprechende Dämpfmechanismen durch lokale Limitierungen der Diskretisierungsordnung dabei nicht berücksichtigt werden, wird für den „ N_2 -Strahl“ Testfall eine Sensitivitätsanalyse mit typischen Werten für C_{DDES} von 0,5 (DDES-1) und 0,6 (DDES-2) durchgeführt. Wie aus Abbildungen 5.8 und 5.9 zu erkennen ist, hat die C_{DDES} -Konstante nur einen geringen Einfluss auf die Lösung. Ein höheres C_{DDES} bewirkt ein etwas dissipativeres Verhalten, wodurch das instationäre Verhalten des kalten N_2 -Strahls gedämpft und damit die Durchmischung mit der warmen Umgebung verringert wird. Dies äußert sich in einem leicht verzögertem Abfall in der Dichte.

Auch für die DDES wurde der Einfluss der Einspritzdichte und -temperatur analysiert. Für

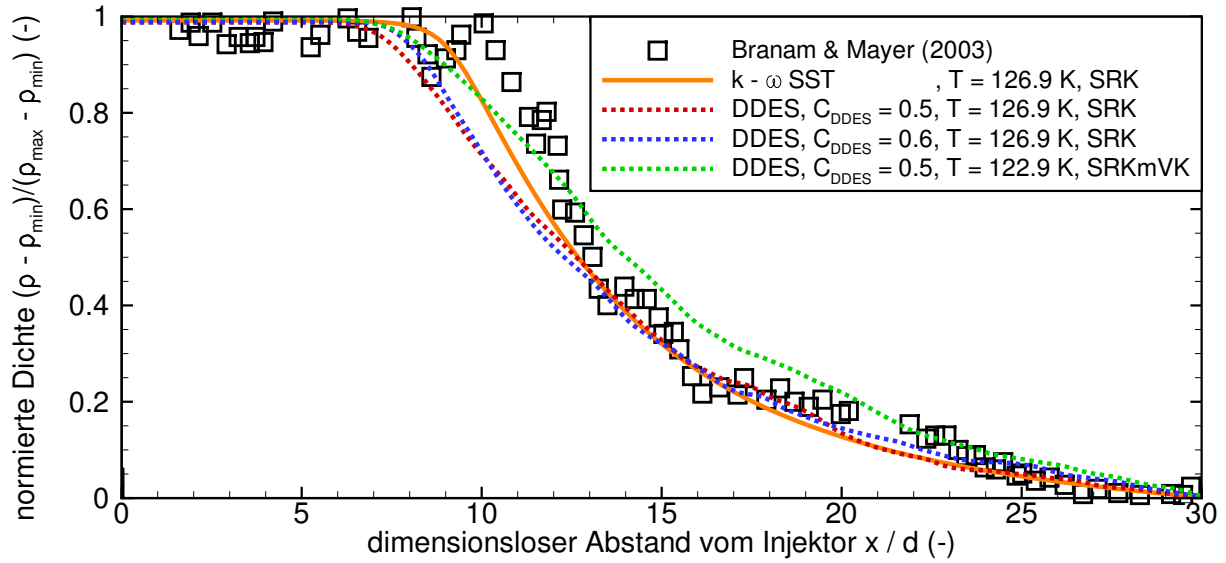


Abbildung 5.8: Vergleich mit RANS und DDES berechneter und gemessener normierter Dichteprofile entlang der Symmetrieachse (zeitlich und in Umfangsrichtung gemittelt) für den „N₂-Strahl“ Testfall. Werte für Dichtenormierung: \square $\rho_{\min} = 100$ kg/m³, $\rho_{\max} = 400$ kg/m³; — $\rho_{\min} = 122$ kg/m³, $\rho_{\max} = 400$ kg/m³; --- $\rho_{\min} = 143$ kg/m³, $\rho_{\max} = 400$ kg/m³; - - - $\rho_{\min} = 143$ kg/m³, $\rho_{\max} = 400$ kg/m³; - - - $\rho_{\min} = 183$ kg/m³, $\rho_{\max} = 541$ kg/m³.

die Simulation DDES-3 ergibt sich mit der geringeren Einspritztemperatur von 4 K und bei Verwendung der SRK Zustandsgleichung mit Volumenkorrektur (SRKmVK) eine um ca. 35 % höhere Dichte am Injektoraustritt (vergleiche Tab. 5.4 und Abb. 5.2(a)). In der normierten Darstellung der Dichteprofile ist der Einfluss jedoch nicht gravierend. Die Simulation DDES-3 liefert einen etwas späteren Abfall der Dichte im axialen Profil und eine etwas breitere Dichteverteilung im Radialprofil im injektornahen Gebiet bei $x/d = 5$.

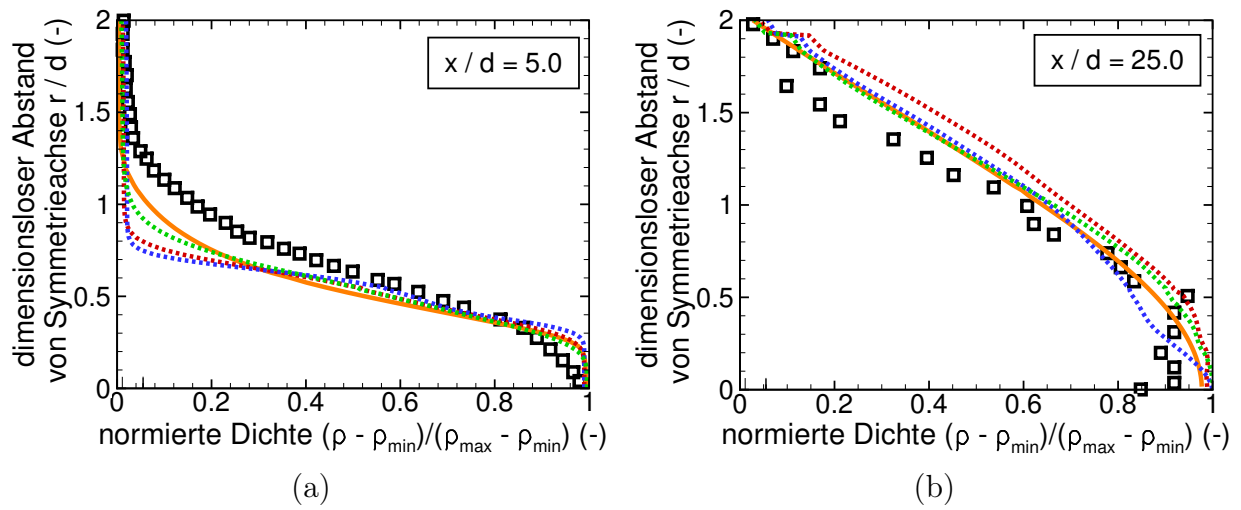


Abbildung 5.9: Vergleich mit RANS und DDES berechneter und gemessener normierter Dichteprofile in radialer Richtung bei $x/d = 5,0$ (a) und $x/d = 25,0$ (b) (zeitlich und in Umfangsrichtung gemittelt) für den „ N_2 -Strahl“ Testfall. Legende wie Abb. 5.8. Werte für Dichtenormierung in (a): \square $\rho_{\min} = 50 \text{ kg/m}^3$, $\rho_{\max} = 390 \text{ kg/m}^3$; — $\rho_{\min} = 79 \text{ kg/m}^3$, $\rho_{\max} = 400 \text{ kg/m}^3$; - - $\rho_{\min} = 101 \text{ kg/m}^3$, $\rho_{\max} = 400 \text{ kg/m}^3$; - - - $\rho_{\min} = 111 \text{ kg/m}^3$, $\rho_{\max} = 543 \text{ kg/m}^3$. Werte für Dichtenormierung in (b): \square $\rho_{\min} = 63 \text{ kg/m}^3$, $\rho_{\max} = 116 \text{ kg/m}^3$; — $\rho_{\min} = 113 \text{ kg/m}^3$, $\rho_{\max} = 135 \text{ kg/m}^3$; - - $\rho_{\min} = 129 \text{ kg/m}^3$, $\rho_{\max} = 156 \text{ kg/m}^3$; - - - $\rho_{\min} = 129 \text{ kg/m}^3$, $\rho_{\max} = 161 \text{ kg/m}^3$; - - - $\rho_{\min} = 153 \text{ kg/m}^3$, $\rho_{\max} = 212 \text{ kg/m}^3$.

5.2 Überkritische CO₂-Rohrströmung

Der zweite Testfall mit inerter Strömung befasst sich mit der Wärmeübertragung an Wänden unter überkritischen Bedingungen. Die Vorhersage der Wärmebelastung und Wandtemperaturen ist essenziell bei der Auslegung von Raketenbrennkammern, um ein Versagen der Struktur zu verhindern und die Leistung des Antriebs zu verbessern. Hier wird der Wärmeübergang einer aufwärts fließenden Strömung in einem senkrechten Rohr untersucht, welches mit überkritischem CO₂ durchströmt wird (Kurganov und Kaptil'ny (1992) [100]). Hierfür stehen gemessene Wandtemperatur- und radiale Geschwindigkeitsprofile an mehreren axialen Positionen zur Validierung der Simulationen zur Verfügung.

Die Vorhersage des Wandwärmeübergangs ist nicht nur essenziell bei der Auslegung von Kühlkanälen in Raketenbrennkammern (Locke und Landrum (2008) [125], Knab et al. (2009) [97], Pizzarelli (2007) [173], Ruan und Meng (2012) [186]), sondern auch in auf- und abwärts gerichteten sowie waagrechten Strömungen in Rohren oder Kanälen zahlreicher weiterer Anwendungen mit überkritischen Drücken: verfahrenstechnische Anwendungen wie überkritische Rektifikation (Hashimoto et al. (2014) [70], Mudraboyina et al. (2015) [151]), Leckageströmungen in Pipelines (Li et al. (2014) [120]) und wassergekühlte Reaktoren (SCWR: supercritical water-cooled reactors) der vierten Generation (Schulenberg et al. (2006) [191]).

In der Literatur finden sich einige Grundlagenexperimente bei unterschiedlichen Bedingungen und mit verschiedenen Fluiden, z. B. mit H₂ (Hendricks et al. (1961, 1966) [73, 74], Hendricks et al. (1965) [75], Thurston (1964) [216], Niino et al. (1982) [156]), CO₂ (Kurganov und Kaptil'ny (1992) [100], Kurganov und Ziegarnik (2005) [101], Bae und Kim (2009) [4], Kim und Kim (2011) [93], Krau (2014) [99]) und H₂O (Shitsman (1963) [193], Yamagata et al. (1972) [247], Pismenny et al. (2006) [171], Wang et al. (2011) [234, 235]).

Numerische Untersuchungen hierzu wurden größtenteils mit RANS Simulationen (Koshizuka et al. (1994) [98], Roelofs (2004) [185], Palko und Anglart (2008) [164], Wen und Gu (2010) [240], Urbano und Nasuti (2012) [221]), vereinzelt aber auch mit LES (Wang et al. (2005) [237], Wang (2006) [236]) oder gar DNS (Bae et al. (2005) [3], Nemati et al. (2013) [154], Chu und Laurien (2016) [30]) durchgeführt. Das komplexe Zusammenspiel von Turbulenz, Gravitation und stark nichtlinearer Thermodynamik in überkritischen Strömungen stellt eine besondere Herausforderung bei der Vorhersage der Wärmeübertragung im untersuchten Testfall dar. Deshalb können insbesondere einfache RANS Simulationen das tatsächliche Strömungsverhalten meist nur qualitativ abbilden.

5.2.1 Testfallbeschreibung

Das modellierte Simulationsgebiet für den untersuchten „CO₂-Rohr“ Testfall von Kurganov und Kaptil'ny (1992) [100] ist in Abb. 5.10 (x -Achse um Faktor 50 gestaucht) dargestellt und

Tabelle 5.5: Geometrische und operative Details für den „CO₂-Rohr“ Testfall.

Geometrische Details	
Länge des (simulierten) nichtbeheizten Rohrabschnitts (mm)	2 000
Länge des (simulierten) beheizten Rohrabschnitts (mm)	3 000
Rohrdurchmesser (mm)	22,7
Operative Details	
nomineller Druck am Rohraustritt (bar)	90,0
Einströmtemperatur (K)	298
Massenstrom (g/s)	850
Wandwärmestrom im beheizten Rohrabschnitt (kW/m ²)	440

repräsentiert den prinzipiellen experimentellen Aufbau. Alle geometrischen und operativen Details sind in Tab. 5.5 zusammengefasst. Überkritisches CO₂ strömt bei 90 bar in einem senkrechten Rohr mit polierten Wänden und einem Durchmesser von $d = 2 R = 22,7$ mm aufwärts. Nach einem unbeheizten Rohrabschnitt mit einer Länge von $50 d \approx 1,135$ m, in dem sich ein turbulentes Strömungsprofil entwickelt, folgt eine beheizte Strecke mit einer Länge von $130 d \approx 2,951$ m. Im Nachlauf schließt sich im Experiment abermals ein unbeheizter Abschnitt der Länge $50 d \approx 1,135$ m an. Die Beheizung erfolgt durch Anlegen von Wechselstrom, wodurch Wärme induziert wird. Das Rohr ist nach außen hin isoliert.

Der untersuchte Testfall in dieser Arbeit entspricht den Bedingungen mit einer Massenstromdichte von $\dot{m}/A = 2100$ kg/(m²s) und dem Wandwärmestrom-zu-Massenstromdichte-Verhältnis $\dot{q}_w/(\dot{m}/A) = 0,21$ kJ/kg mit der Querschnittsfläche A des Rohres. Dies ergibt einen Massenstrom von $\dot{m} = 850$ g/s und eine konstante Wärmestromdichte von $\dot{q}_w = 440$ kW/m². Die operativen Randbedingungen sind so gewählt, dass Gravitation entgegen der Hauptströmungsrichtung eine entscheidende Rolle spielt und sich ein komplexes Strömungsfeld durch freie und erzwungene Konvektion ausbildet.

Da die Einströmtemperatur von 298 K (Raumtemperatur) bei 90 bar knapp unterhalb der auf der Widom-Linie liegenden pseudo-kritischen Temperatur (ca. 313 K für die SRK Zustandsgleichung, siehe Abb. 5.11(b) und Abschnitt 2.1) von CO₂ liegt, kommt es beim Aufheizen des Fluids zu lokal sehr starken Variationen der Dichte (Abb. 5.11(a)) sowie weiterer Stoffgrößen wie der (molaren) Wärmekapazität bei konstantem Druck (Abb. 5.11(b)), der laminaren Prandtlzahl (Abb. 5.11(c)) sowie der Viskosität und Wärmeleitfähigkeit (Abb. 5.11(d)). Diese können nur mit einer entsprechenden Realgasgleichung bzw. Realgasmodellierung akkurat

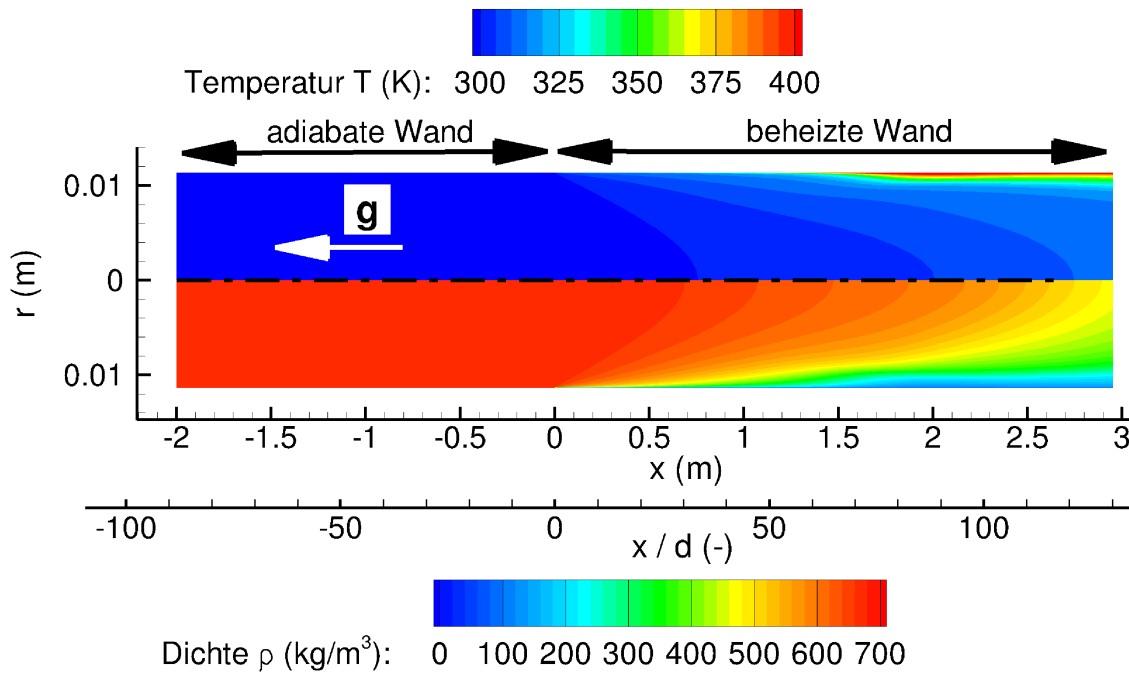


Abbildung 5.10: Dichte- und Temperaturkonturen der Referenzsimulation für den „CO₂-Rohr“ Testfall (x -Achse um Faktor 50 gestaucht).

wiedergegeben werden. Größere Abweichungen in der Dichte gegenüber REFPROP Daten ergeben sich auch mit der SRK Zustandsgleichung. Dies kann jedoch im relevanten Temperaturbereich durch eine Volumenverschiebung von $c = +6,0 \cdot 10^{-6} \text{ m}^3/\text{mol}$ behoben werden⁶². Das Modell von Huber und Hanley (1996) [82] zeigt ebenfalls eine sehr gute Übereinstimmung mit REFPROP Korrelationen für die Viskosität und Wärmeleitfähigkeit. Die relativen Abweichungen können jedoch bei Temperaturen zwischen 300 K und 600 K bis zu ca. 10% betragen, was sich entsprechend auf die Vorhersage des Wärmeübergangs an den Wänden auswirken kann.

Für das Experiment ist ein umfangreicher Datensatz für die Validierung der CFD-Simulationen vorhanden. Einerseits wurden Wandtemperaturen mittels Chromel-Alumel Thermoelementen bestimmt (siehe Abb. 5.12), welche bis auf 0,5 K genau sein sollen (Kurganov und Kaptil'ny (1992) [100]). Andererseits stehen normierte Radialprofile⁶³ der zeitlich gemittelten Axialgeschwindigkeit (siehe Abb. 5.13) zur Verfügung. Diese wurden mit einem Pitotrohr an verschiedenen Positionen im beheizten Abschnitt gemessen. Das komplexe Zusammenspiel aus Turbulenz, Gravitation und Realgaseffekten ist noch nicht vollständig verstanden. Auf Basis experimenteller Daten von Kurganov und Kaptil'ny (1992) [100] sowie Kurganov und Ziegarnik (2005) [101] gibt es jedoch Erklärungsversuche, welche durch DNS von Bae et al. (2005) [3] bestätigt wurden. Eine detaillierte Beschreibung der auftretenden Effekte

⁶² Dieser Wert wurde so gewählt, dass sich eine gute Übereinstimmung mit Dichtewerten aus REFPROP ergibt.

⁶³ Die Normierung erfolgt mit der querschnittsgemittelten Axialgeschwindigkeit u_b (engl.: bulk velocity). Diese kann im Experiment nur näherungsweise bestimmt werden, was zu Abweichungen beim Vergleich mit simulierten Daten führt.

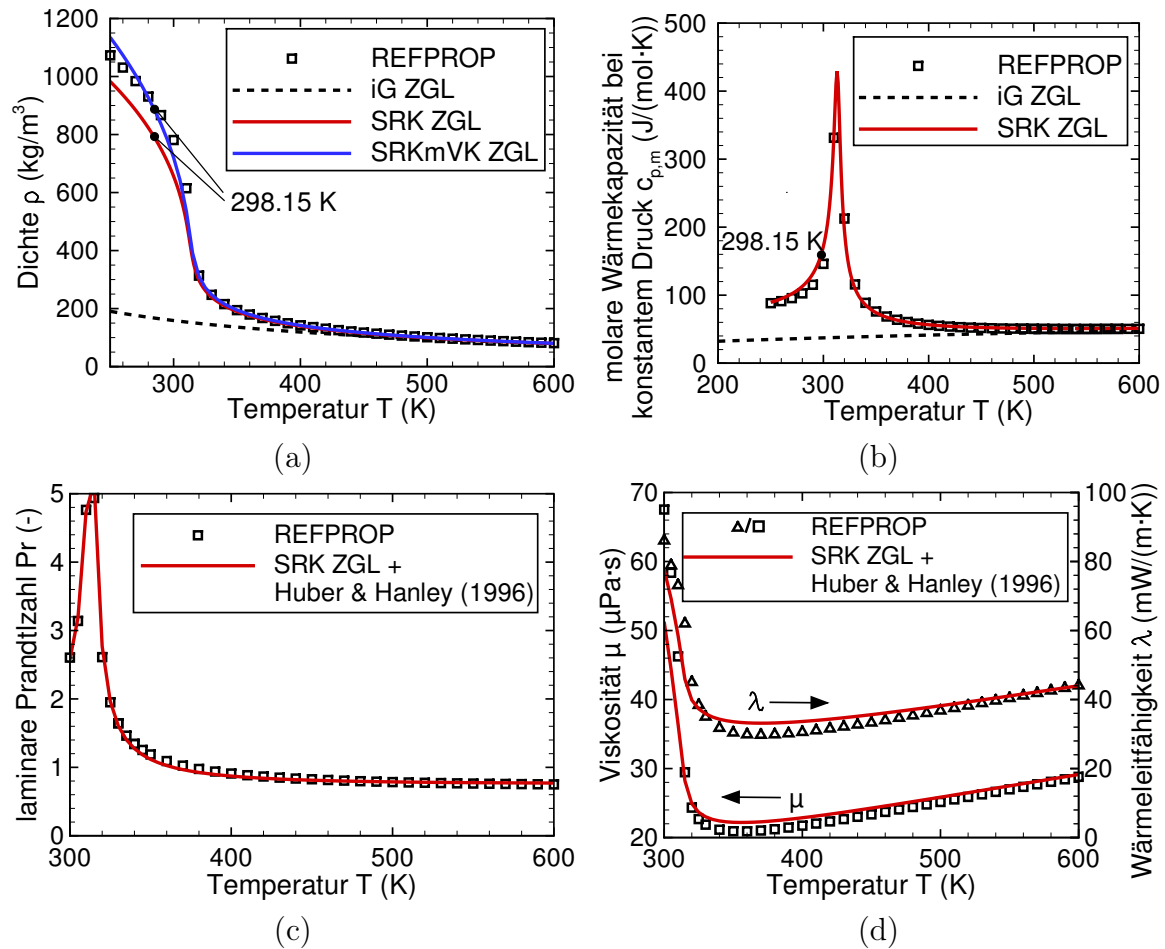


Abbildung 5.11: Dichte (a), molare Wärmekapazität bei konstantem Druck (b), laminare Prandtlzahl (c) sowie molekulare Viskosität und Wärmeleitfähigkeit (d) von CO₂ bei 90 bar in Abhängigkeit der Temperatur berechnet mit der idealen Gasgleichung, der SRK (in Kombination mit dem Modell von Huber und Hanley (1996) [82]) bzw. der SRKmVK Zustandsgleichung und REFPROP.

findet sich in Bae et al. (2005) [3] und Löwenberg (2007) [126]. An dieser Stelle werden die grundlegenden Effekte zum besseren Verständnis erläutert.

Sobald die Strömung auf die beheizte Wand trifft, bildet sich zunächst eine typische Temperaturgrenzschicht aus, welche zu Beginn schnell anwächst und deren Zuwachs sich im weiteren Verlauf abschwächt (Abb. 5.12). Der rasche Temperaturanstieg des wandnahen Fluids bei Temperaturen knapp über 300 K geht einher mit einer starken Dichteabnahme und Variation der Stoffparameter (Abb. 5.11). Während sich die Kernströmung im weiteren Verlauf durch die Gravitation allmählich verzögert, wirken mit zunehmender Lauflänge aufgrund des großen Dichtegradienten an der Wand starke Auftriebskräfte, so dass es zu einer Beschleunigung in Wandnähe kommt. Durch das Abflachen des Geschwindigkeitsprofils in Wandnähe (außer direkt an der Wand) nehmen auch die Geschwindigkeitsgradienten und damit die Turbulenzproduktion ab (Abbildungen 5.13(a) - 5.13(d)). Durch die rasche Abnahme der laminaren Viskosität werden die Schubspannungen zusätzlich verringert. Nach Petukhov und

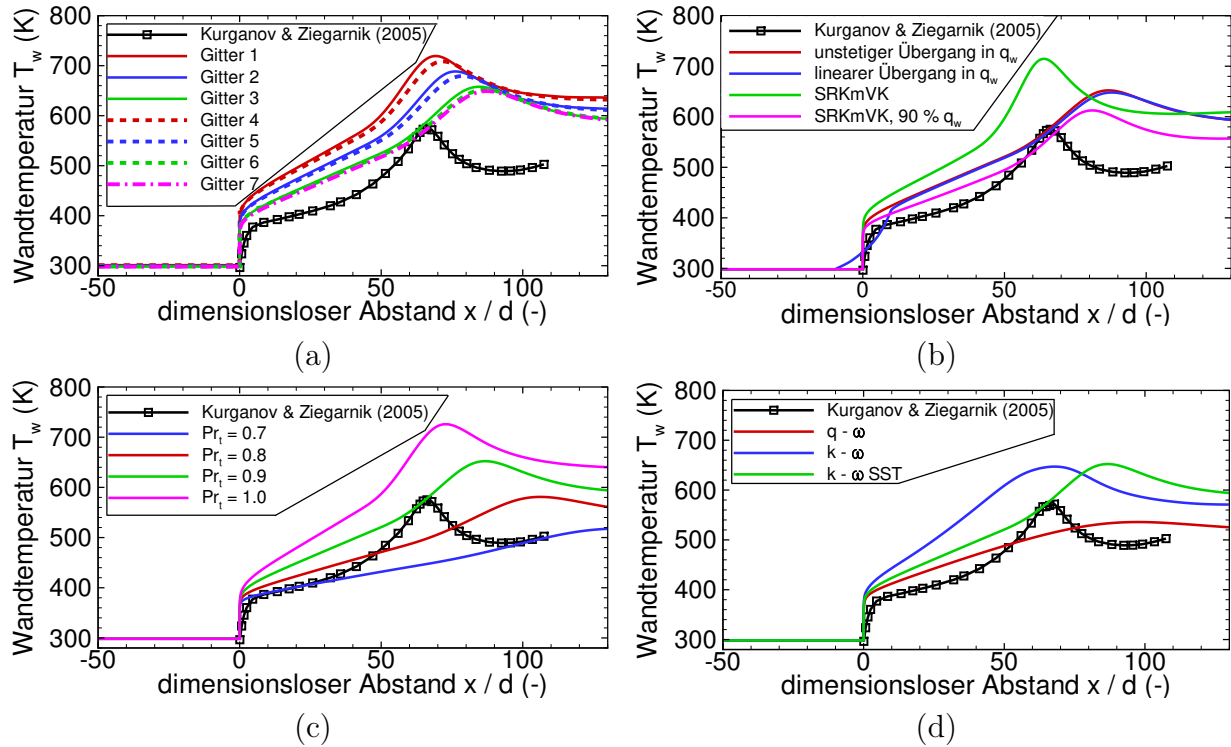


Abbildung 5.12: Berechnete und gemessene Wandtemperaturen für den „CO₂-Rohr“ Testfall. Vergleich verschiedener Gitter (a), Wandwärmestromverläufe und Zustandsgleichungen (b)*, turbulenter Prandtlzahlen (c) und Turbulenzmodelle (d). Experimentelle Daten von Kurganov und Ziegarnik (2005) [101] wurden Löwenberg (2007) [126] entnommen.

* Rote Kurve entspricht der Referenzsimulation. Legende gibt Abweichungen zum Referenzsetup aus Tab. 5.7 an.

Polyakov (1988) [170] nimmt die Turbulenzintensität und damit der radiale Transport von Masse und Wärme in Gebieten mit stabiler Dichteverteilung $g \frac{\partial \bar{p}}{\partial x} < 0$, wie sie im vorderen Teil des beheizten Abschnitts bis zum Erreichen der maximalen Wandtemperatur auftritt, ab. In Zuge dessen entkoppelt sich die wandnahe Schicht fast vollständig von der Kernströmung. Es kommt zu einem Anstauen von Wärme an der Wand und die Wandtemperatur steigt daraufhin stark an. Dieser Effekt wird in der Literatur als verschlechterter Wärmetransport (engl.: deteriorated heat transfer) bezeichnet.

Solange die Beschleunigungskraft die Reibungskraft überwiegt, beschleunigt die Strömung in Wandnähe weiter. Es bildet sich ein M-förmiges Geschwindigkeitsprofil mit einer Geschwindigkeitsüberhöhung in Wandnähe aus (Abbildungen 5.13(e) - 5.13(h)). Die Turbulenzproduktion und damit die radiale Wärmeleitung ist in diesem Gebiet mit geringer Schubspannung $\bar{\tau} \sim \frac{\partial \bar{u}}{\partial r} \approx 0$ zunächst sehr eingeschränkt (Löwenberg (2007) [126]). Im weiteren Verlauf kommt es ca. ab der Position des Wandtemperaturmaximums, ab der auch ein größerer Teil der Kernströmung die pseudo-kritische Temperatur übersteigt und beschleunigt, zu einer Wiederanregung der Turbulenz. Der Grund hierfür liegt in einer Interaktion zwischen turbulenten Dichte-, Geschwindigkeits- und Enthalpiefluktuationen, welche durch den Einfluss der Gravitation getrieben und eng mit dem M-förmigen Geschwindigkeitsprofil verknüpft

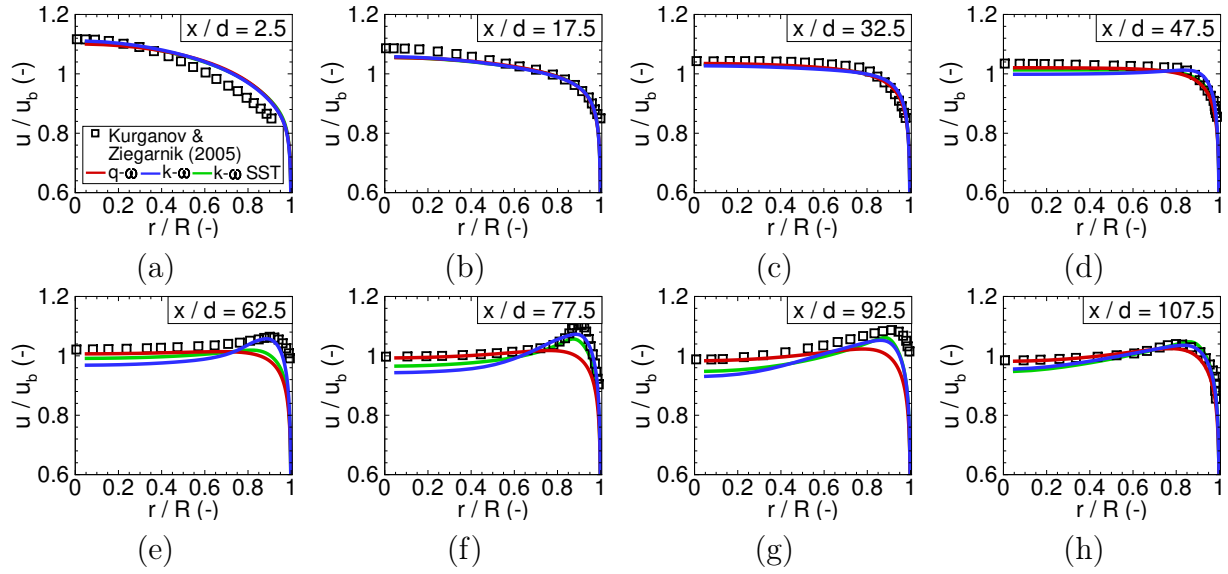


Abbildung 5.13: Vergleich mit verschiedenen Turbulenzmodellen berechneter und gemessener Radialprofile der Axialgeschwindigkeit bei verschiedenen axialen Positionen für den „CO₂-Rohr“ Testfall. Experimentelle Daten von Kurganov und Ziegarnik (2005) [101] wurden Löwenberg (2007) [126] entnommen.

sind (Bae et al. (2005) [3]). Der erhöhte turbulente Austausch in der nun instabilen Dichteverteilung ($g \frac{\partial \bar{\rho}}{\partial x} > 0$) führt zu einem Abfluss von Wärme in die Kernströmung, wodurch die Wandtemperatur schließlich trotz weiterhin konstanter Wärmezufuhr von außen über die Wand wieder absinkt (Abb. 5.12).

5.2.2 Numerisches Setup

Das simulierte Rechengebiet ist in Abb. 5.10 dargestellt (x -Achse um Faktor 50 gestaucht). Der Nachlauf nach der beheizten Strecke wurde nicht simuliert. Alle Simulationen dieses Testfalls sind stationär und 2D-achsensymmetrisch. Es wurde eine umfangreiche Gitterstudie durchgeführt. Die Eigenschaften der verwendeten Gitter sind in Tab. 5.6 zusammengefasst. N_{x1} , N_{x2} und N_r bezeichnen die Anzahl der Zellen in axialer Richtung im unbeheizten und beheizten Rohrabchnitt sowie in radialer Richtung. N ist die Gittergröße. Δy_w bezeichnet die radiale Ausdehnung der wand nächsten Zelle und EV steht für das Expansionsverhältnis in radialer Richtung von der wand nächsten Zelle hin zur Symmetrielinie. Der dimensionslose Wandabstand der ersten Zelle auf dem Gitter 6, auf welchem die Referenzsimulation für diesen Testfall durchgeführt wurde, ist durch die sehr feine Wandaufösung im Bereich $y^+ \leq 0,1$.

Der unbeheizte Rohrabchnitt wurde mit einer adiabaten Wand simuliert. Im beheizten Abschnitt wurde entsprechend der Wandwärmestrom vorgegeben. Die Wandtemperatur wurde über das Fourier'sche Gesetz (siehe Glg. (3.1.9)) mit einer Approximation erster Ordnung für den Temperaturgradienten ermittelt, wobei die Wärmeleitfähigkeit aus der wand nächsten Zelle genommen wurde. Das aufgeprägte Einströmprofil ist uniform. Alle Rechnungen

Tabelle 5.6: Eigenschaften der untersuchten Gitter für den „CO₂-Rohr“ Testfall.

Gitter	N_{x1}	N_{x2}	N_r	N	Δy_w	EV
1	200	400	44	26 400	$1,0 \cdot 10^{-6}$	1,20
2	200	400	48	28 800	$5,0 \cdot 10^{-7}$	1,20
3	200	400	56	33 600	$1,0 \cdot 10^{-7}$	1,20
4	200	400	74	44 400	$1,0 \cdot 10^{-6}$	1,10
5	200	400	82	49 200	$5,0 \cdot 10^{-7}$	1,10
6	200	400	98	58 800	$1,0 \cdot 10^{-7}$	1,10
7	200	400	226	135 600	$1,0 \cdot 10^{-8}$	1,05
8	400	800	226	271 200	$1,0 \cdot 10^{-8}$	1,05
9	800	1600	226	542 400	$1,0 \cdot 10^{-8}$	1,05
10	100	200	98	29 400	$1,0 \cdot 10^{-7}$	1,10

wurden auf 24 CPUs durchgeführt. Auch für diesen Testfall wurde eine umfangreiche Parameterstudie durchgeführt. Die Einstellungen der Referenzsimulation sind in Tab. 5.7 gegeben.

5.2.3 Simulationsergebnisse

Dichte- und Temperaturkonturen für die Referenzsimulation sind in Abb. 5.10 dargestellt. Wie zu erkennen ist, erwärmt sich zunächst nur das wandnahe CO₂ aufgrund des verschlechterten Wärmetransports. Ab $x/d \approx 70$ kommt es zu einem vermehrten radialen Austausch

Tabelle 5.7: Einstellungen der Referenzsimulation für den „CO₂-Rohr“ Testfall.

Gitter	6
Wandwärmestromverlauf	konstant
Turbulenzmodell	$k - \omega$ SST
turbulente Prandtlzahl	0,9
Polynomrekonstruktion / Limiter	5. Ordnung MLP ^{ld}
Fluidmischung	100 % CO ₂
Zustandsgleichung	SRK

und die Kernströmung erwärmt sich auf Temperaturen oberhalb der pseudo-kritischen Temperatur. Die Dichte nimmt dann entsprechend rasch ab.

In einem ersten Schritt wurde der Einfluss des Rechengitters untersucht. Dabei zeigte sich, dass die Auflösung an der Wand und in der Grenzschicht für eine gitterunabhängige Lösung sehr fein sein muss. Ein Vergleich zwischen gemessenen und simulierten Wandtemperaturen für die Gitter 1 bis 7 unter Verwendung sonst gleicher Einstellungen wie für das Referenzsetup sind in Abb. 5.12(a) abgebildet. Linien gleicher Linienart besitzen dasselbe Expansionsverhältnis, Linien gleicher Farbe denselben Wandabstand der wandnächsten Zelle. Ein feineres Expansionsverhältnis geht einher mit einer besseren Grenzschichtauflösung. Eine feinere wandnächste Zelle kann bei gleichbleibendem Expansionsverhältnis nicht ganz unabhängig von der Grenzschichtauflösung betrachtet werden.

Das Expansionsverhältnis hat auf allen Gittern einen sichtbaren Einfluss. Ein niedrigeres Expansionsverhältnis senkt den Verlauf der Wandtemperatur ab. Wesentlich stärker ist der Einfluss des wandnächsten Zellabstands. Erst mit $\Delta y_w = 1,0 \cdot 10^{-7}$ wird eine nahezu gitterunabhängige Lösung erzielt. Im Vergleich zum Experiment wird vor allem der initiale Temperaturanstieg an der Wand in allen Simulationen zu hoch vorhergesagt. Das Wandtemperaturmaximum wird deutlich überschätzt und liegt tendenziell zu weit stromab.

In weiteren Simulationen wurde die Sensitivität bezüglich der axialen und radialen Auflösung mit den Gittern 7, 8, 9 und 10 untersucht (nur Lösung auf Gitter 7 bildlich dargestellt in Abb. 5.12(a)). Eine halb so feine axiale Auflösung mit dem Gitter 10 im Vergleich zum Referenzgitter 6 hatte nur einen geringfügigen Einfluss. Auf dem sehr feinen Gitter 7 wurde eine weitere axiale Verfeinerung um den Faktor 2 (Gitter 8) bzw. 4 (Gitter 9) geprüft. In allen drei Fällen resultiert weiterhin ein stationäres Strömungsfeld und die berechneten Wandtemperaturen sind nahezu identisch mit den Wandtemperaturen auf dem Gitter 6.

Die Unterschiede im Verlauf der Wandtemperatur sind vor allem auf den unterschiedlich starken Anstieg gleich zu Beginn des beheizten Abschnitts zurückzuführen, welcher das Verhalten stromab stark beeinflusst. Das unterschiedliche Verhalten der verschiedenen Gitter ist jedoch nicht durch unterschiedliche Einströmbedingungen am Beginn des beheizten Abschnitts verursacht. Abbildung 5.14 vergleicht die Radialprofile der Axialgeschwindigkeit und der turbulenten Viskosität für die Gitter 1 bis 6 bei einem Abstand von $x/d = -2,5$, also vor Beginn der beheizten Wand. Die Profile zeigen nur geringe Unterschiede.

Zur Bestätigung wurde als weiterer Test für den Referenzfall der aufgeprägte Wärmestrom modifiziert, in dem ein gewisses Maß an Wärmeleitung angenommen wurde (siehe Abb. 5.12(b)). Anstatt eines harten Umschaltens von adiabater zu beheizter Wand wurde ein linearer Anstieg des Wärmestroms im Bereich $-10 < x/d < 10$ aufgeprägt. Obwohl dies eine starke Störung des Geschwindigkeits- und Temperaturfeldes am Eintritt des beheizten Abschnitts bedeutet, sind die Wandtemperaturverläufe in beiden Fällen für $x/d > 10$ nahezu deckungsgleich.

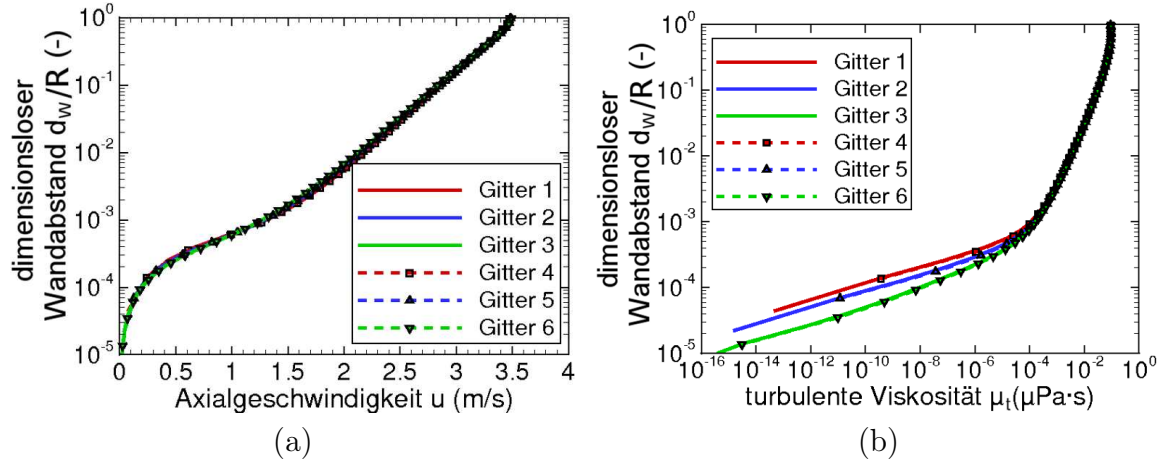


Abbildung 5.14: Vergleich von Profilen der Axialgeschwindigkeit (a) und der turbulenten Viskosität (b) für verschiedene Gitter am Ende des adiabaten Rohrabchnitts bei $x/d = -2,5$. d_w ist der Abstand zur Wand.

Der starke Einfluss der Wandauflösung durch das Rechengitter ist auf die großen Variationen der Fluideigenschaften an der Wand zurückzuführen (Abb. 5.11). Die dortige Temperatur überschreitet beim Erwärmen die pseudo-kritische Temperatur. Die Variation verschiedener Stoffwerte über den dimensionslosen Wandabstand bei $x = 1$ mm ist in Abb. 5.15 dargestellt. Die Werte in den Zellzentren jeder Zelle sind durch die Symbole gekennzeichnet. Im Bereich $2 < y^+ < 10$ ändert sich die Dichte ca. um einen Faktor 3. Die laminare Viskosität und Wärmeleitfähigkeit variieren um einen Faktor 2 in diesem Bereich, in dem die Reibung gegenüber der Turbulenz noch dominiert ($\mu_t/\mu < 1$). Die molare Wärmekapazität und die laminare Prandtlzahl ändern sich um den Faktor 4 bis 5. Diese starken Variationen erzwingen eine sehr feine Grenzschichtauflösung um eine gitterunabhängige Lösung zu erhalten. Weiter stromauf ($x < 1$ mm) in den allerersten Zellen des beheizten Abschnitts verlaufen die starken Variationen noch näher an der Wand. Eine extrem feine Wandauflösung ist deshalb an dieser Stelle essenziell und wirkt sich, wie aus Abb. 5.12(a) hervorgeht, deutlich auf die berechneten Wandtemperaturen stromab aus.

Auf dem Gitter 6 wurde wie schon für den „N₂-Strahl“ Testfall der Einfluss der turbulenten Prandtlzahl sowie des Turbulenzmodells untersucht. Aus numerischen Untersuchungen eines ähnlichen Testfalls mittels DNS von Nemati et al. (2013) [154] geht hervor, dass die turbulente Prandtlzahl in Wandnähe sehr stark im Bereich $0,7 < Pr_t < 1,1$ schwankt. In dieser Arbeit wurde eine Variation der turbulenten Prandtlzahl von 0,7 bis 1,0 durchgeführt. Die entsprechenden Wandtemperaturen sind in Abb. 5.12(c) gegenübergestellt. Eine größere turbulente Prandtlzahl verringert den modellierten turbulenten Wärmetransport. In Folge dessen staut sich mehr Wärme an der Wand und die maximale Wandtemperatur erhöht sich. Mit allen turbulenten Prandtlzahlen wird der initiale Temperaturanstieg zu stark vorhergesagt. Qualitativ ergibt sich unter Verwendung des $k-\omega$ SST Modells mit $Pr_t = 1,0$ die beste Übereinstimmung des Wandtemperaturverlaufs mit dem Experiment hinsichtlich der Kurvenform und der Position des Temperaturmaximums. Das allgemeine Temperaturlevel ist allerdings deutlich

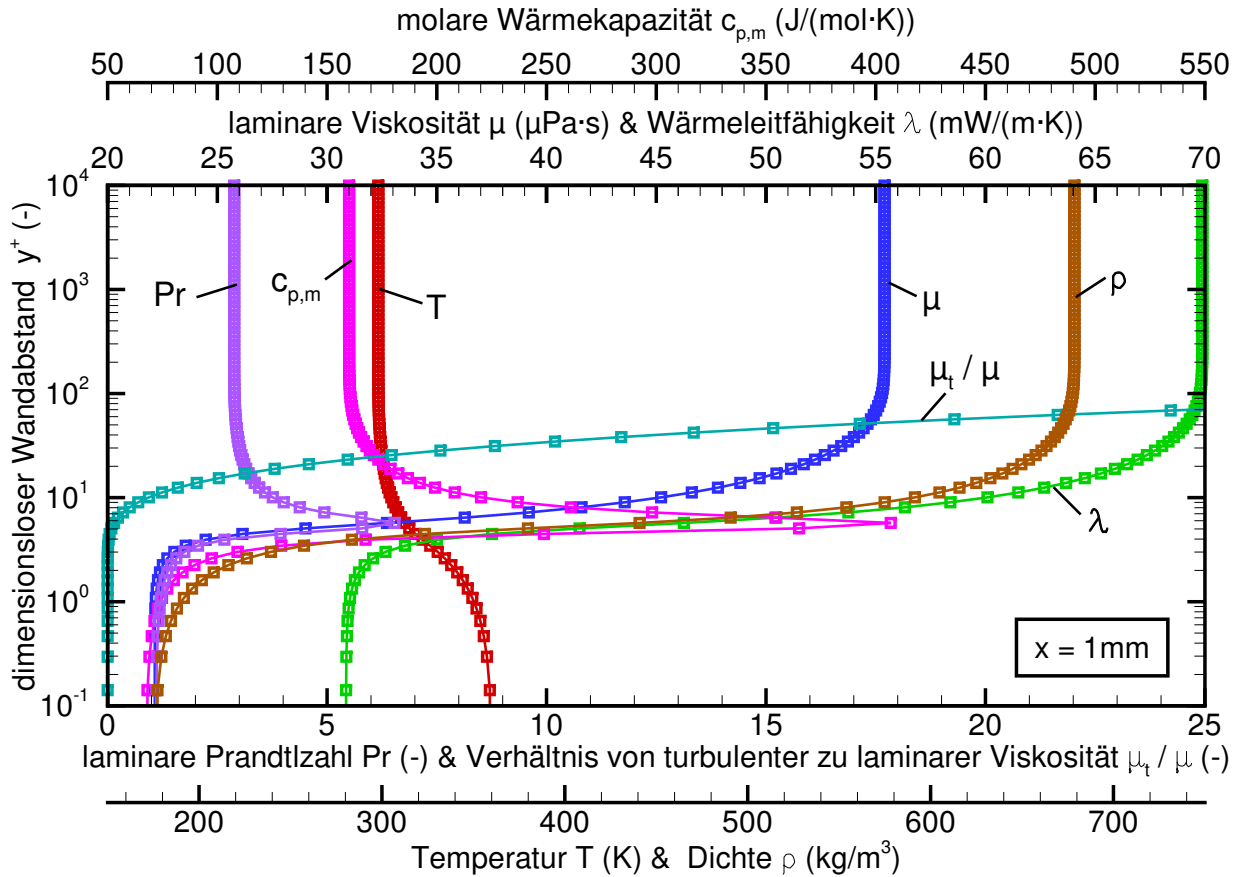


Abbildung 5.15: Radialprofile verschiedener Größen in der Referenzsimulation bei $x = 1$ mm für den „CO₂-Rohr“ Testfall.

zu hoch. Die Höhe des Temperaturmaximums sowie der initiale Temperaturanstieg werden mit $Pr_t = 0,8$ wesentlich besser getroffen. Ein zufriedenstellendes Ergebnis kann durch eine Variation der (konstanten) turbulenten Prandtlzahl in diesem Fall nicht erzielt werden.

Der Einfluss verschiedener Turbulenzmodelle auf den Verlauf der Wandtemperatur ist in Abb. 5.12(d) gegenübergestellt. Die Unterschiede sind ähnlich groß wie bei der Variation der turbulenten Prandtlzahl. Qualitativ ergibt sich mit dem $k-\omega$ SST Modell der Referenzsimulation die beste Übereinstimmung mit dem experimentellen Verlauf. Das $q-\omega$ zeigt kein ausgeprägtes Temperaturmaximum wie im Experiment. Im $k-\omega$ Modell wird der qualitativ zunehmende Temperaturanstieg bis zum Maximum nur unzureichend wiedergegeben. RANS Simulationen scheinen damit die komplexe Interaktion zwischen Turbulenz, Gravitation und Realgaseffekten nur begrenzt abbilden zu können. Da die thermodynamischen Bedingungen an Wänden in Raketenbrennkammern in der Regel bei Temperaturen oberhalb der pseudokritischen Temperatur liegen und der Einfluss von Gravitation vernachlässigbar ist, ist hier mit weniger komplexen Strömungsphänomenen und einer besseren Vorhersage der Wandwärmelast zu rechnen.

Da die SRK Zustandsgleichung bei niedrigen Temperaturen ($T < 310$ K) die Dichte gegenüber REFPROP Daten deutlich unterschätzt, wurde eine Simulation mit einer Volumenkorrektur

von $c = +6,0 \cdot 10^{-6} \text{ m}^3/\text{mol}$ (siehe Abb. 5.11(a)) durchgeführt. Der qualitative Verlauf der Wandtemperatur sowie die Position des Temperaturmaximums weichen sichtbar zu den Ergebnissen ohne Volumenkorrektur ab und werden mit Volumenkorrektur besser vorhergesagt (Abb. 5.12(b)). Das Temperaturlevel ist jedoch deutlich zu hoch. Die Berücksichtigung eines möglicherweise niedrigeren Wärmestroms (90 % des im Experiment angegebenen Wertes) senkt zwar die Temperaturen an der Wand ab, verschlechtert jedoch im Gegenzug den qualitativen Verlauf der Wandtemperatur.

Neben den Wandtemperaturprofilen wurden auch die Radialprofile der Axialgeschwindigkeit näher betrachtet. Ein Vergleich für die Simulationen mit Variation des Turbulenzmodells aus Abb. 5.12(d) mit experimentellen Daten findet sich in Abb. 5.13. Für den unbeheizten Abschnitt liegen keine Vergleichsdaten vor. Kurz nach Beginn der beheizten Wand bei $x/d = 2,5$ sind deutliche Unterschiede zwischen den Simulationen und dem Experiment beobachtbar (Abb. 5.13(a)). Die numerischen Ergebnisse sind sich jedoch sehr ähnlich. Die Beschleunigung des erhitzten und dünneren Fluids an der Wand sowie das Abflachen der Geschwindigkeitsprofile zur Kernströmung hin werden gut vorhergesagt (Abbildungen 5.13(b) - 5.13(d)). Erste sichtbare Abweichungen innerhalb der Rechnungen sind in Abb. 5.13(d) bei $x/d = 47,5$ erkennbar. Das M-förmige Geschwindigkeitsprofil bildet sich in der $k-\omega$ Simulation am weitesten stromauf aus. Dies deckt sich mit dem weiter stromauf liegenden Maximum im Wandtemperaturverlauf in Abb. 5.12(d). Das Geschwindigkeitsmaximum in Wandnähe bildet sich in der $q-\omega$ Simulation, im Gegensatz zur $k-\omega$ und $k-\omega$ SST Simulation, nicht aus (Abbildungen 5.13(e) - 5.13(f)). Für das $q-\omega$ Modell ist auch kein ausgeprägtes Wandtemperaturmaximum erkennbar (siehe Abb. 5.12(d)). Die Beschleunigung der Kernströmung und die Reduzierung der Geschwindigkeitsüberhöhung nach dem Wandtemperaturmaximum werden in den $k-\omega$ basierten Simulationen gut getroffen. (Abbildungen 5.13(g) - 5.13(h)).

Neben den gezeigten Parametervariationen wurden auch die Einflüsse weiterer Einstellungen getestet. Die Diskretisierungsordnung (5. Ordnung bzw. 2. Ordnung mit MLP^{ld}) hatte keinen merklichen Einfluss. Auch eine leichte Beimischung von Luft, wie von Kurganov und Kaptil'ny (1992) [100] diskutiert, zeigte keinen signifikanten Effekt. Zusammenfassend kann geschlossen werden, dass einfache RANS Simulationen das sehr komplexe Strömungsverhalten in diesem Testfall nur begrenzt wiedergeben können. LES bzw. DDES könnten gegenüber den RANS Rechnungen Verbesserungen bringen, wurden aber in dieser Arbeit auch aufgrund des erheblich größeren Rechenaufwandes nicht durchgeführt.

5.3 Überkritische H_2 - O_2 Verbrennung: Mascotte Brennkammer

Das Ziel dieser Arbeit ist die Simulation von Raketenbrennkammern mit transkritischer Einspritzung. Der erste Testfall hierzu mit Verbrennung ist der „Mascotte A-60“ Testfall, welcher wie der „ N_2 -Strahl“ als Validierungsexperiment auf dem IWRCM-2 vorgestellt wurde (Thomas und Zurbach (2001) [215]). Dort wird dieser Testfall unter der Bezeichnung RCM3 geführt. Kryogenes O_2 (LOX) wird bei überkritischem Druck in die Kammer eingeleitet und verbrennt dort mit warmem H_2 . Die untersuchte Brennkammer wurde in den vergangenen Jahren in zahlreichen Testkampagnen auf ONERAs Mascotte Testanlage experimentell untersucht (Juniper et al. (2000) [90], Habiballah et al. (2006) [68], Candel et al. (2006) [19]).

Numerische Simulationen zu diesem Testfall wurden von Depoutre et al. (2001) [42], Görgen und Knab (2001) [63], Legrand et al. (2001) [112], Cheng und Farmer (2006) [26], Benarous und Liazid (2009) [11], Cutrone (2009) [35], Ruiz (2012) [187], Pohl et al. (2013) [174], Jarczyk (2013) [88], Poschner und Pfitzner (2009, 2010) [179, 178], Coclite et al. (2015) [33], Banuti et al. (2016) [7] sowie Benmansour et al. (2016) [12] durchgeführt. In allen Veröffentlichungen wurden ausschließlich RANS Simulationen durchgeführt. Dabei wurde der quadratische Querschnitt bis auf 3D-Simulationen von Benmansour et al. (2016) [12] stets 2D-rotationssymmetrisch angenähert.

5.3.1 Testfallbeschreibung

Abbildung 5.16 zeigt das simulierte Gebiet zum „Mascotte A-60“ Testfall. Die geometrischen und operativen Eckdaten dazu finden sich zusammengefasst in Tab. 5.8. LOX bei einer Temperatur von 85 K und warmes H_2 bei 287 K strömen durch einen Koaxialinjektor in eine Brennkammer mit quadratischem Querschnitt. Die genaue Injektorgeometrie ist nicht bekannt. Die verwendeten Abmaße der Simulation sind in Tab. 5.8 zusammengefasst. Am Injektoraustritt des O_2 -Zulaufs befindet sich eine konische Aufweitung. Die Faceplate ist um 10 mm stromab versetzt. Die Brennkammerlänge beträgt in etwa 477 mm und die Kantenlänge des Querschnitts ist mit 50 mm angegeben. Die genaue Düsengeometrie ist nicht bekannt, jedoch ist der Düsenhalsdurchmesser mit 9 mm angegeben. Quartzfenster erlauben optischen Zugang für OH^* -Emissionen Spektroskopie und werden mit einem He-Film gekühlt, dessen Temperatur und Massenstrom ebenfalls unbekannt sind.

Für die Validierung der CFD-Simulationen stehen ausschnittsweise Abel-transformierte Aufnahmen der OH^* -Emissionen in Injektornähe zur Verfügung, welche ein Indikator für die Flammenposition sind. Außerdem existieren axiale und radiale Temperaturprofile. Der Brennkammerdruck liegt in etwa zwischen 60 und 70 bar. Die Testbedingungen variieren leicht in den zugehörigen Veröffentlichungen mit der Bezeichnung „A-60“, was in unterschiedlich hohen

Tabelle 5.8: Geometrische und operative Details für den „Mascotte A-60“ Testfall.

Geometrische Details	
Geometrie des Brennkammerquerschnitts im Experiment	quadratisch
Länge der Brennkammer (mm)	477,0
Düsenhalsdurchmesser (mm)	9,0
Kantenlänge des Brennkammerquerschnitts (mm)	50,0
Länge des konischen Injektorabschnitts der O ₂ -Zuleitung (mm)	7,0
Durchmesser der O ₂ -Zuleitung, Injektoreintritt (mm)	3,2
Durchmesser der O ₂ -Zuleitung, Injektoraustritt (mm)	5,0
Durchmesser der H ₂ -Zuleitung, innen (mm)	5,6
Durchmesser der H ₂ -Zuleitung, außen (mm)	10,0
axialer Abstand zwischen Faceplate und Injektoraustritt (mm)	10,0
Operative Details	
nomineller Brennkammerdruck (bar)	60 ... 70
Einspritztemperatur O ₂ (K)	85
Einspritztemperatur H ₂ (K)	298
Massenstrom O ₂ (g/s)	100,0
Massenstrom H ₂ (g/s)	70,0
O/F Verhältnis (-)	1,43

Drücken resultiert (60 bar in Thomas und Zurbach (2001) [215], 67 bar in Habiballah et al. (2006) [68] und 70 bar in Juniper et al. (2000) [90]). Der genaue Wert bei den untersuchten Bedingungen ist nicht bekannt.

Abbildung 5.17 zeigt die Dichte von O₂ und H₂^(p) sowie die molare Wärmekapazität von O₂ im Niedertemperaturbereich (< 300 K) bei einem Druck von 65 bar berechnet mit der idealen Gasgleichung, der SRK Zustandsgleichung sowie mit REFPROP. Die Einströmtemperaturen für H₂ sind so hoch, dass für dieses von einem Idealgasverhalten ausgegangen werden kann⁶⁴. O₂ zeigt bei den gegebenen Testbedingungen ein ausgeprägtes Realgasverhalten im Bereich der Einspritzung bis zur Erwärmung auf 300 K. Im relevanten Druck- und Temperaturbereich

⁶⁴ H₂ wurde in diesem Testfall als H₂⁽ⁿ⁾ behandelt, was bei Temperaturen über der gegebenen Einspritztemperatur jedoch nicht weiter relevant ist.

kann das thermodynamische Verhalten von H_2 und O_2 auch ohne Volumenverschiebung sehr gut wiedergegeben werden.

5.3.2 Numerisches Setup

Das simulierte Rechengebiet und -gitter ist in Abb. 5.16 dargestellt. Der Injektor wurde wiederum künstlich verlängert (nicht dargestellt). Alle Simulationen wurden 2D-achsensymmetrisch durchgeführt. Um das Brennkammervolumen zu erhalten, wurde zur Annäherung des quadratischen Querschnitts der experimentellen Brennkammer ein Radius von 28,21 mm in der Simulation verwendet. Das verwendete Rechengitter ist mit 63 500 Elementen relativ grob aufgelöst, so dass sich in den durchgeführten Simulationen zumeist ein stationäres Strömungsfeld einstellte. Die Anzahl der Zellen in radialer Richtung über die Höhe der Injektorleitungen und des Posttips ist jeweils 31. Die wandorthogonale Ausdehnung der wandnächsten Zellen wurde zu $1\text{ }\mu\text{m}$ gesetzt, womit in der Regel Werte von $y^+ < 2$, größtenteils sogar $y^+ < 1$ erreicht werden. Die O_2 -Zuleitung wurde mit einer Anfasung am Injektoraustritt und nicht vereinfacht wie in Thomas und Zurbach (2001) [215] dargestellt modelliert. Ebenso wurde die zurückversetzte Faceplate berücksichtigt. Die Wände wurden standardmäßig als adiabat und hydraulisch glatt angenommen. Der He-Kühlfilm, dessen Eigenschaften nicht bekannt sind, wurde vernachlässigt. Alle Rechnungen wurden auf 23 CPUs durchgeführt.

Auch für diesen Testfall wurde wieder der Einfluss eines breiten Spektrums an Parametern auf die Simulationsergebnisse untersucht. Die Einstellungen der Referenzsimulation mit den untersuchten Parametern sind in Tab. 5.9 zusammengestellt.

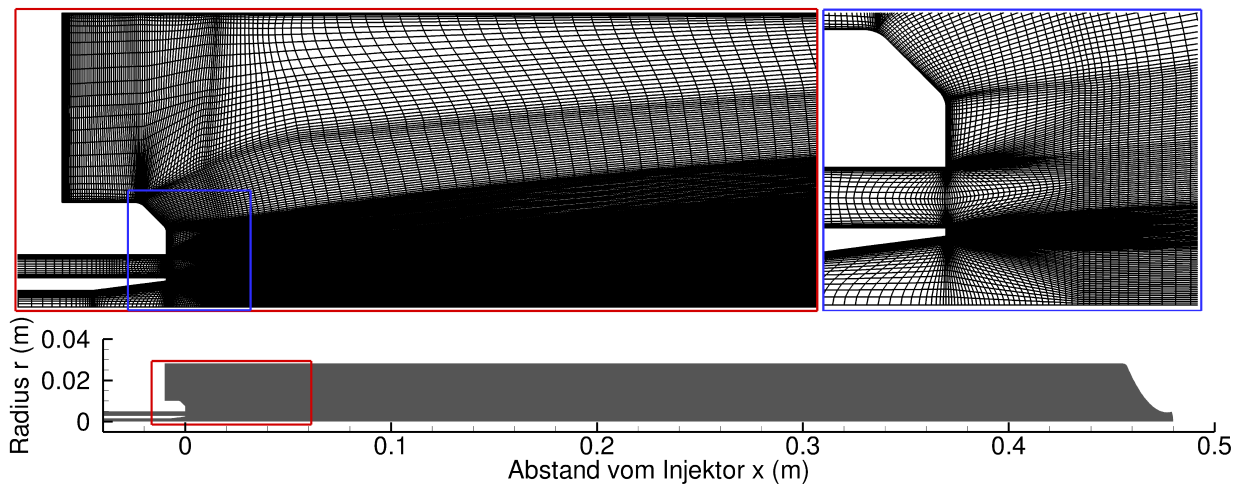


Abbildung 5.16: Simuliertes Rechengebiet und -gitter für den „Mascotte A-60“ Testfall.

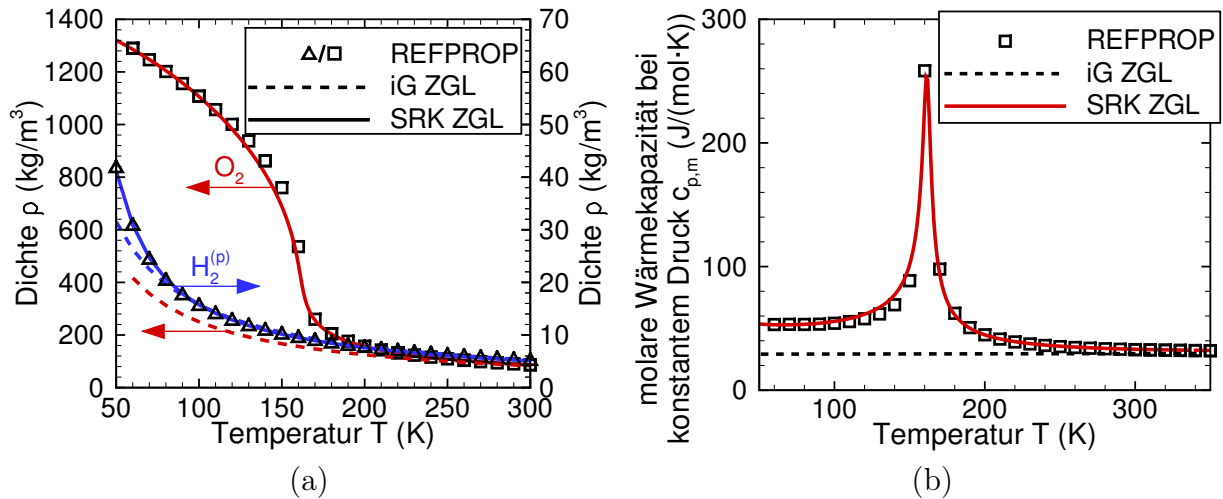


Abbildung 5.17: Dichte von O_2 und $\text{H}_2^{(p)}$ (a) sowie molare Wärmekapazität bei konstantem Druck von O_2 (b) bei 65 bar in Abhängigkeit der Temperatur berechnet mit der idealen Gasgleichung, der SRK Zustandsgleichung und REFPROP.

Tabelle 5.9: Einstellungen der Referenzsimulation für den „Mascotte A-60“ Testfall.

Modellierung der Brennkammerwände	adiabat
Reaktionsmechanismus	Ó Conaire et al. (2004)
Turbulenzmodell	$q - \omega$
turbulente Prandtlzahl	0,7
Polynomrekonstruktion / Limiter	2. Ordnung MLP ^{ld}
Zustandsgleichung	SRK

5.3.3 Simulationsergebnisse

Die Temperaturkonturen und Dichtekonturen überlagert mit Stromlinien sind für drei verschiedene Setups in Abb. 5.18 abgebildet. Ausgehend von der Referenzsimulation mit dem $q - \omega$ Turbulenzmodell sowie einer turbulenten Prandtl- und Schmidtzahl von 0,7 (Abb. 5.18(b)) wurde einmal das Turbulenzmodell auf $k - \omega$ SST (Abb. 5.18(c)) und einmal die turbulenten Kennzahlen auf $\text{Pr}_t = \text{Sc}_t = 0,9$ (Abb. 5.18(a)) geändert. Das Strömungsfeld ist in allen drei Simulationen relativ komplex und qualitativ ähnlich. In Injektornähe bilden sich in der äußeren Strömung zwei gegenrotierende Rezirkulationszonen aus, deren Ausmaß sich hauptsächlich bei Variation des Turbulenzmodells unterscheidet. Auch die Flammenform nimmt insbesondere bei Verwendung verschiedener Turbulenzmodelle eine stark unterschiedliche Form an. Während die Flamme mit dem $q - \omega$ Turbulenzmodell kurz und breit ist, ist sie mit dem $k - \omega$ SST Modell sehr lang und schmal. Auch die Aufweitung der Flamme in radialer Richtung hin zur Wand ist mit dem $k - \omega$ SST Modell wesentlich geringer. Eine radial diffusivere Flamme mit dem $q - \omega$ Modell wurde auch im nachfolgend präsentierten Testfall einer zylindrischen

Brennkammer bei ähnlichen Bedingungen festgestellt. Im Falle des k - ω Modells konnte keine stationäre Lösung erzielt werden. Stattdessen bildeten sich instationäre Schwankungen aus. Auch dieses Phänomen wurde in Simulationen des nachfolgenden Testfalls beobachtet.

Ein Vergleich des Temperaturfeldes für das q - ω Turbulenzmodell und $\text{Pr}_t = \text{Sc}_t = 0,9$ mit der gemessenen Intensität der OH^* -Konzentrationen I_{OH^*} aus Juniper et al. (2000) [90] zeigt eine sehr gute Übereinstimmung (siehe Abb. 5.19). Die Länge der Flamme wird bei diesen Einstellungen mit ca. 0,1 m sehr gut getroffen, was auch durch einen Vergleich des axialen Temperaturprofils auf der Achse mit dem Experiment deutlich wird (Abb. 5.20(a)). Mit einer niedrigeren turbulenten Prandtl- und Schmidtzahl von 0,7 (Referenzsimulation) erhöht sich der modellierte turbulente Wärme- und Stofftransport. Dies führt entgegen der ursprünglichen Erwartung allerdings zu einer längeren Flamme (siehe Abb. 5.18(a) und 5.18(b) sowie Abb. 5.20(a)). Die radiale Ausdehnung der Flamme nimmt jedoch ab (siehe Abbildungen 5.18(a) und 5.18(b)). Dies geht auch aus den radialen Temperaturprofilen bei $x = 15$ mm, $x = 50$ mm und $x = 100$ mm aus Abb. 5.21 hervor. Die Temperaturen auf der Achse hinter der Flammenzone bleiben von dieser Variation praktisch unberührt (Abb. 5.20(a)).

Die genannten Effekte bei Variation der turbulenten Prandtl- und Schmidtzahl wurden auch im Falle des k - ω SST Modells in ähnlichem Ausmaß festgestellt (nicht dargestellt). Die Flammenlänge wird mit dem k - ω SST Modell ca. um den Faktor 3 überschätzt (Abb. 5.20(a)). Zudem wird die Temperatur auf der Achse am Ende der Brennkammer zu hoch vorhergesagt, da der simulierte radiale Transport von kaltem H_2 zur Achse hin zu gering ist.

Die radiale Position der heißen Flammenzone ist im Experiment aufgrund der groben Auflösung nicht zu erkennen und liegt unter Beachtung der OH^* -Bilder aus Abb. 5.19 vermutlich unterhalb des ersten Messpunktes bei $x = 15$ mm (Abb. 5.21(a)). Die Flamme weitet in Simulationen mit dem q - ω Modell etwas zu stark auf und erscheint etwas zu diffusiv in radialer Richtung. Hingegen ist die radiale Aufweitung mit dem k - ω SST Modell deutlich schmaler. Die gemessenen Temperaturen in den äußeren Rezirkulationszonen werden bei $x = 15$ mm mit beiden Turbulenzmodellen sehr gut wiedergegeben. An dem Vergleich bei $x = 50$ mm (Abb. 5.21(b)) und $x = 100$ mm (Abb. 5.21(c)) zeigt sich, dass die Temperaturen im äußeren Wandbereich weiterhin mit beiden Modellen sehr gut getroffen werden. Dies ist vor allem für die Vorhersage der Wärmebelastung an den Brennkammerwänden wichtig. Die Flamme des q - ω Modells wird wie schon erwähnt zu breit vorhergesagt, während sich mit dem k - ω SST Modell eine wesentlich schmalere Flammenzone ergibt, was den experimentellen Daten näher kommt.

Wird wie hier geschehen die Düse mit modelliert und der Massenstrom am Einlass vorgegeben, so stellt sich der Brennkammerdruck in der Kammer entsprechend ein, anstatt über eine Unterschallrandbedingung am Auslass vorgegeben zu werden. In der Referenzsimulation beträgt der Brennkammerdruck über die gesamte Brennkammerlänge nahezu konstant 68,4 bar. Dies liegt nahe am Wert von 67 bar wie er von Habiballah et al. (2006) [68] angege-

ben wird. In einer Vergleichssimulation mit isothermen anstatt adiabaten Wänden mit einer aufgeprägten Wandtemperatur von 500 K ergab sich ein Brennkammerdruck von 68,1 bar. Wärmeverluste über die Wände scheinen damit keine große Rolle zu spielen. Auch die Temperaturprofile zeigten keine größeren Abweichungen zum adiabaten Fall (nicht dargestellt). Gleiches gilt für Simulationen mit den Referenzeinstellungen und abgeschnittener Düse, bei denen am Auslass ein Druck von 60 bzw. 70 bar aufgeprägt wurde (siehe Abb. 5.20(b)).

Obwohl sowohl in der $q-\omega$ als auch der $k-\omega$ SST Lösung O_2 vollständig verbrennt, ergab sich mit dem $k-\omega$ SST Modell ein weitaus niedrigerer Brennkammerdruck mit 63,7 bar gegenüber zum $q-\omega$ Modell mit 68,4 bar. Der Grund hierfür liegt möglicherweise in einer erhöhten Turbulenzproduktion in der Düse mit dem $q-\omega$ Modell, welche das Geschwindigkeitsprofil in der Düse stark beeinflusst (hier nicht dargestellt). Dieser Trend wurde auch im nachfolgenden Testfall beobachtet.

In weiteren Simulationen wurden der Einfluss des detaillierten Reaktionsmechanismus (Burke et al. (2012) [18] statt Ó Conaire et al. (2004), gleiche Spezies und Reaktionsanzahl) und einer höheren Diskretisierungsordnung (fünfte statt zweite Ordnung MLP^{ld}) untersucht. Dabei wurden keine signifikanten Unterschiede festgestellt.

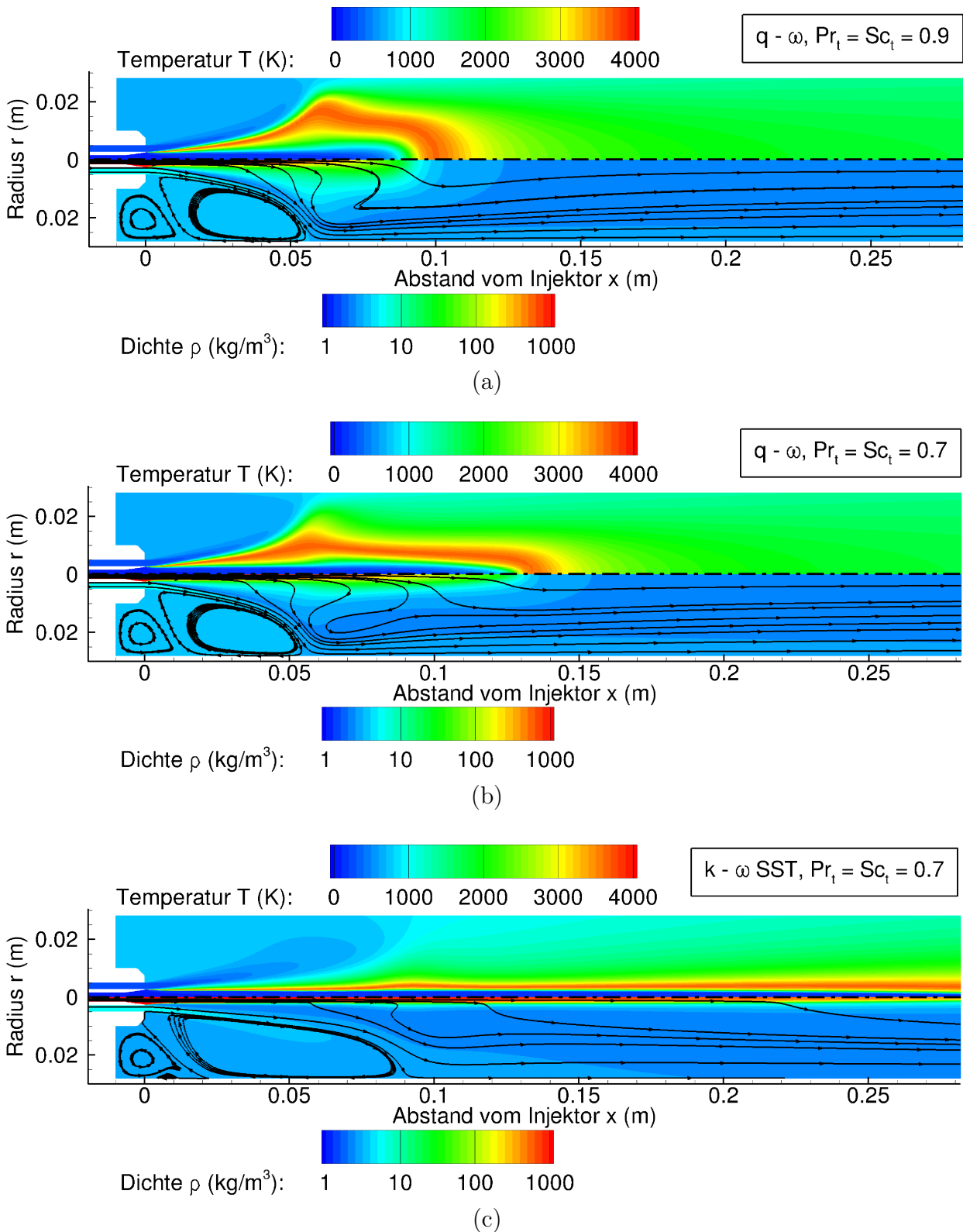


Abbildung 5.18: Vergleich der Temperaturkonturen (obige Halfen) sowie der Dichtekonturen uberlagert mit Stromlinien (untere Halfen) zwischen Simulationen mit unterschiedlichem Turbulenzmodell und unterschiedlicher turbulenter Prandtl- und Schmidtzahl fur den „Mascotte A-60“ Testfall: $q - \omega, Pr_t = Sc_t = 0,9$ (a), $q - \omega, Pr_t = Sc_t = 0,7$ (b), $k - \omega SST, Pr_t = Sc_t = 0,7$ (c).

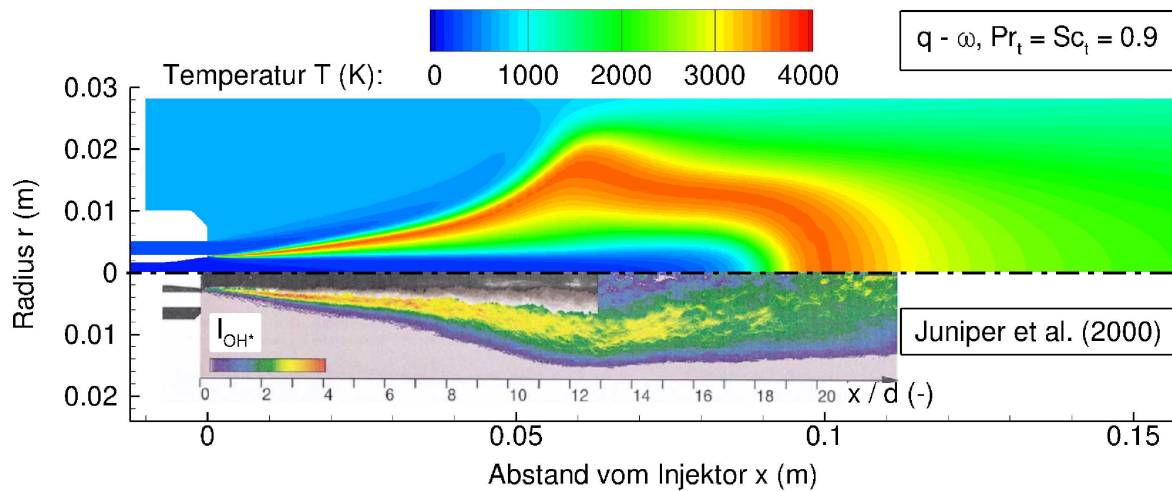


Abbildung 5.19: Gegenüberstellung der simulierten Temperaturkonturen ($q-\omega$ Turbulenzmodell, $Pr_t = Sc_t = 0.9$) und der gemessenen Intensität der OH^* -Konzentrationen I_{OH^*} aus Juniper et al. (2000) [90] für den „Mascotte A-60“ Testfall.

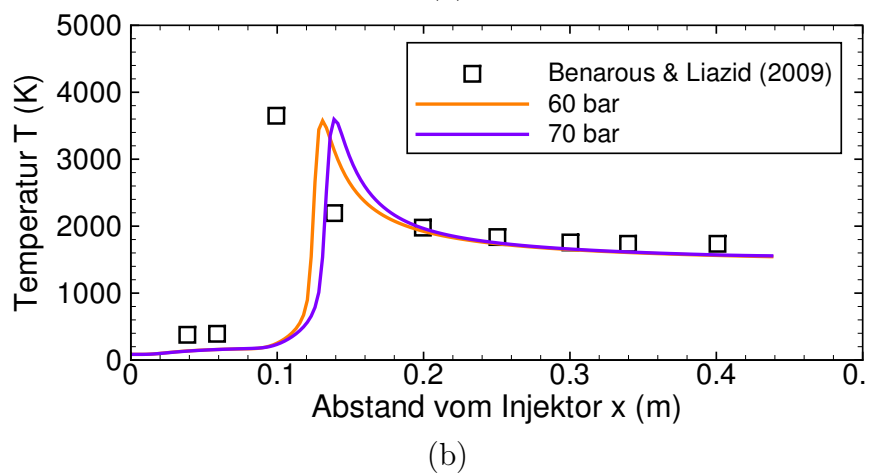
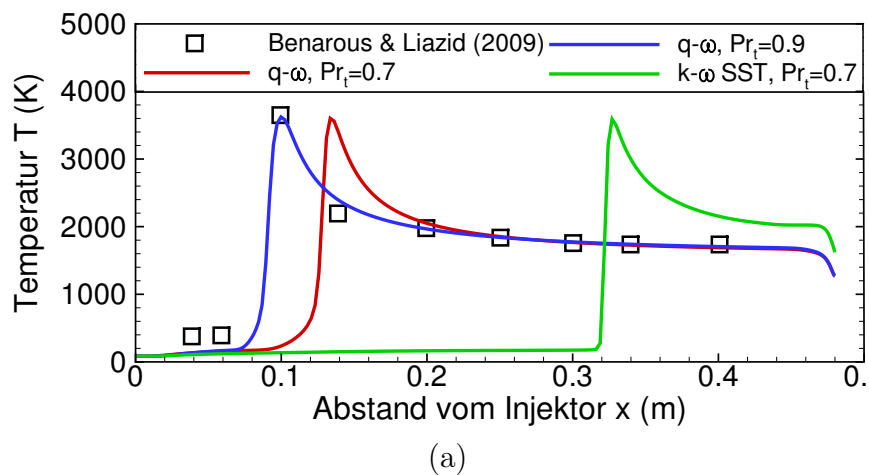


Abbildung 5.20: Vergleich der axialen Temperaturprofile auf der Symmetrielinie zwischen verschiedenen Simulationen des „Mascotte A-60“ Testfalls mit (a) und ohne (b) Düse und experimentellen Messwerten entnommen aus Benarous und Liazid (2009) [11].

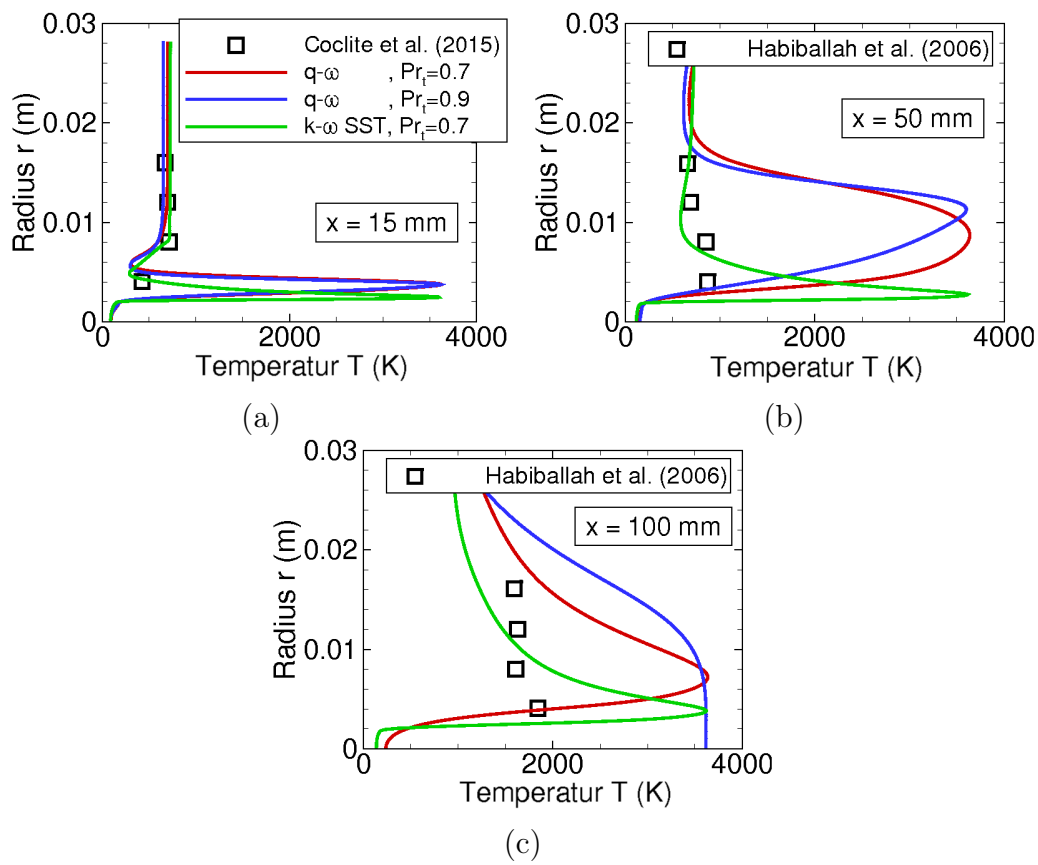


Abbildung 5.21: Vergleich der radialen Temperaturprofile bei $x = 15 \text{ mm}$ (a), $x = 50 \text{ mm}$ (b) und $x = 100 \text{ mm}$ (c) zwischen verschiedenen Simulationen des „Mascotte A-60“ Testfalls und experimentellen Messwerten entnommen aus Coclite et al. (2015) [33] bzw. Habiballah et al. (2006) [68].

5.4 Überkritische $H_2 - O_2$ Verbrennung: DLR Brennkammer C

Der zweite Testfall mit Verbrennung ist ähnlich zum vorherigen Testfall „A-60“. Es handelt sich erneut um eine Modellraketenbrennkammer mit einem zentralen Koaxialinjektor, welche vom DLR in Lampoldshausen betrieben wird (Smith (2002, 2007) [200, 201], Suslov et al. (2015, 2016) [210, 211]). Experimentelle Daten zu den „DLR“ Testfällen sind bisher nur teilweise veröffentlicht und wurden unter anderem im DLR-Projekt ProTau gewonnen. Numerische Untersuchungen zu diesen Testfällen wurden bisher von Seidl et al. (2016) [192] und Fechter et al. (2017) [48] veröffentlicht.

5.4.1 Testfallbeschreibung

H_2 und O_2 verbrennen wiederum als brennstoffreiches Gemisch bei einem Druck von etwa 60 bar in einer Modellraketenbrennkammer. Die Einspritztemperaturen von H_2 sind jedoch wesentlich niedriger als im vorherigen Testfall „A-60“. Die Brennkammer ist zylindrisch anstatt quadratisch, hat jedoch mit einer Länge von 430 mm und einem Durchmesser von 50 mm sehr ähnliche Abmaße. Die Brennkammer besteht aus vier untereinander austauschbaren und hintereinander montierten Modulen, wovon eines durch Quartzfenster optischen Zugang zur Brennkammer gewährt. Ein H_2 -Kühlfilm wird durch einen Schlitz an der Faceplate in die Brennkammer eingebracht und bewahrt die Brennkammerwände vor einer zu hohen thermischen Belastung. Die konvergent-divergente Düse sowie der Injektor können variabel bestückt werden.

Fünf verschiedene Betriebspunkte werden in dieser Arbeit untersucht. Die entsprechenden geometrischen und operativen Details sind in Tab. 5.10 übersichtlich zusammengefasst. In den Testfällen „DLR-1A“, „DLR-1B“ und „DLR-1C“ wird bei sonst sehr ähnlichen Bedingungen das O/F-Verhältnis am Injektor variiert. Alle drei Testfälle verwenden die Konfiguration „BKC-1“ („Brennkammer C“, Variante 1). Für die Testfälle „DLR-2“ und „DLR-3“ wurden die Konfigurationen „BKC-2“ und „BKC-3“ verwendet. Die beiden letzteren Testfälle grenzen sich zu den anderen drei Testfällen durch deutlich niedrigere Einspritztemperaturen vor allem bezüglich von H_2 ab.

Im Falle der ersten drei Betriebspunkte liegen umfangreiche experimentelle Daten von Suslov et al. (2015, 2016) [210, 211] sowie aus dem DLR-Projekt ProTau zur Validierung der CFD-Simulationen vor. Unter anderem wurden die Länge des dichten LOX-Strahls L_{LOX} mittels Schattengraphbilder bestimmt. Weiterhin wurden Brennkammerdrücke gemessen und Wandtemperaturmessungen durchgeführt. Für die beiden letzten Fälle von Smith (2002, 2007) [200, 201] wurden unter anderem spektrale Leistungsdichten der Druckfluktuationen ermittelt.

Wie im „A-60“-Testfall werden für den Bereich des kryogenen LOX-Strahls starke Real-

gaseffekte erwartet. Für sehr niedrige Einspritztemperaturen im Testfall „DLR-3“ treten auch im Bereich des sehr kalt eingespritzten H_2 Abweichungen zum Idealgasmodell auf (siehe Abb. 5.17(a)).

5.4.2 Numerisches Setup

Die für die „DLR“ Testfälle verwendeten wichtigsten Einstellungen sind in Tab. 5.11 zusammengefasst. Eine Begrenzung der limitierten Machzahl Ma_0 in der Präkonditionierung (siehe Abschnitt 4.1.1) und im AUSM⁺-up Schema (siehe Abschnitt 4.2.2.2) auf Werte oberhalb von 0,10 wurde benötigt, um stabile Lösungen zu erhalten. Alle Simulationen wurden 2D-achsensymmetrisch auf einem Gitter mit 324 000 Volumen und 360 CPUs durchgeführt. Verfeinerungen des Gitters wurden wiederum in der Injektorregion und zu den Wänden hin vorgenommen. Die Randbedingungen werden analog zum „A-60“ Testfall gesetzt. Stationäre RANS-Lösungen wurden wie schon im „A-60“ Testfall nur mit dem q - ω und k - ω SST Modell erzielt. Mit dem k - ω Modell bildeten sich, wenn auch nur verhältnismäßig leichte, hydrodynamische Instabilitäten aus, welche zu Schwankungen in der Wärmefreisetzung und im Druck führten. Das k - ω Modell wurde entsprechend für die beiden letzten Testbedingungen eingesetzt, um mittels URANS Simulationen das im Experiment gemessene, instationäre, akustische Verhalten der Brennkammer zu analysieren.

5.4.3 Simulationsergebnisse

Konturen der Dichte, der Temperatur sowie der Massenbrüche von H_2 (überlagert mit Stromlinien) und O_2 sind in Abb. 5.22 für eine q - ω Simulation mit $Pr_t = Sc_t = 0,7$ für den Fall „DLR-1C“ mit $O/F = 4$ abgebildet. Der starke Kühlungseffekt des H_2 -Films an der Wand ist aus den Konturen der Temperatur und des H_2 -Massenbruchs klar erkennbar. Die Wandtemperaturen bleiben bis zum Ende des zylindrischen Brennkammerteils im Bereich unterhalb von 600 K. Im Falle des k - ω SST Modells wurde wie schon zuvor im „Mascotte A-60“ Testfall eine weniger diffusive, schmalere und längere Flamme beobachtet (hier nicht dargestellt). Das sich ausbildende Strömungsfeld (siehe Stromlinien) ist mit mehreren, gegenrotierenden Rezirkulationszonen sehr komplex.

Die Länge des kalten und dichten LOX-Strahls sowie der Flamme ist wesentlich länger als im „Mascotte A-60“ Testfall. Die Reaktionszone breitet sich in der q - ω Lösung teilweise bis in die Düse aus. Mit dem k - ω SST Modell erreicht sie sogar den Düsenaustritt, so dass nicht unerhebliche Mengen an unverbranntem O_2 die Brennkammer verlassen. Wie aus Abb. 5.22 hervorgeht, ist unverbranntes, gasförmiges O_2 noch deutlich weiter stromab zu beobachten als der sichtbare, dichte LOX-Strahl. Letzterer wurde im Experiment noch an Positionen $x > 0,3$ m detektiert. Es ist deshalb wahrscheinlich, dass auch im Experiment eine nicht zu vernachlässigende Menge O_2 die Brennkammer verlässt. Der Wirkungsgrad sowie

Tabelle 5.10: Geometrische und operative Details für die „DLR“ Testfälle.

Geometrische Details					
Geometrie des Brennkammerquerschnitts im Experiment	kreisförmig				
Länge der Brennkammer (mm)	430,0				
Brennkammerdurchmesser (mm)	50,0				
Durchmesser der O ₂ -Zuleitung (mm)	4,0				
Spalthöhe der H ₂ -Zuleitung, Kühlfilm (mm)	1,0				
	BKC-1	BKC-2	BKC-3		
Düsenhalsdurchmesser (mm)	16,9	16,8	16,8 [†]		
Durchmesser der H ₂ -Zuleitung, innen (mm)	4,6	4,4 [‡]	4,4 [‡]		
Durchmesser der H ₂ -Zuleitung, außen (mm)	6,8	6,5	5,8		
Operative Details					
	DLR-1A	DLR-1B	DLR-1C	DLR-2	DLR-3
Geometrie	BKC-1	BKC-1	BKC-1	BKC-2	BKC-3
nomineller Brennkammerdruck (bar)	62	61	61	60	63
Injektor O/F Verhältnis (-)	5,91	4,91	3,96	4,83	3,75
globales O/F Verhältnis (-)	1,32	1,22	1,12	1,00	0,97
Einspritztemperatur O ₂ (K)	113,0	112,7	112,8	115,5	95,7
Einspritztemperatur H ₂ , Injektor (K)	151,3	153,2	155,0	117,0	66,7
Einspritztemperatur H ₂ , Kühlfilm (K)	313,0	318,0	320,5	320,5 [*]	320,5 [*]
Massenstrom O ₂ (g/s)	355	328	311	290	300
Massenstrom H ₂ , Injektor (g/s)	60	67	79	60	80
Massenstrom H ₂ , Kühlfilm (g/s)	209	203	199	230	230

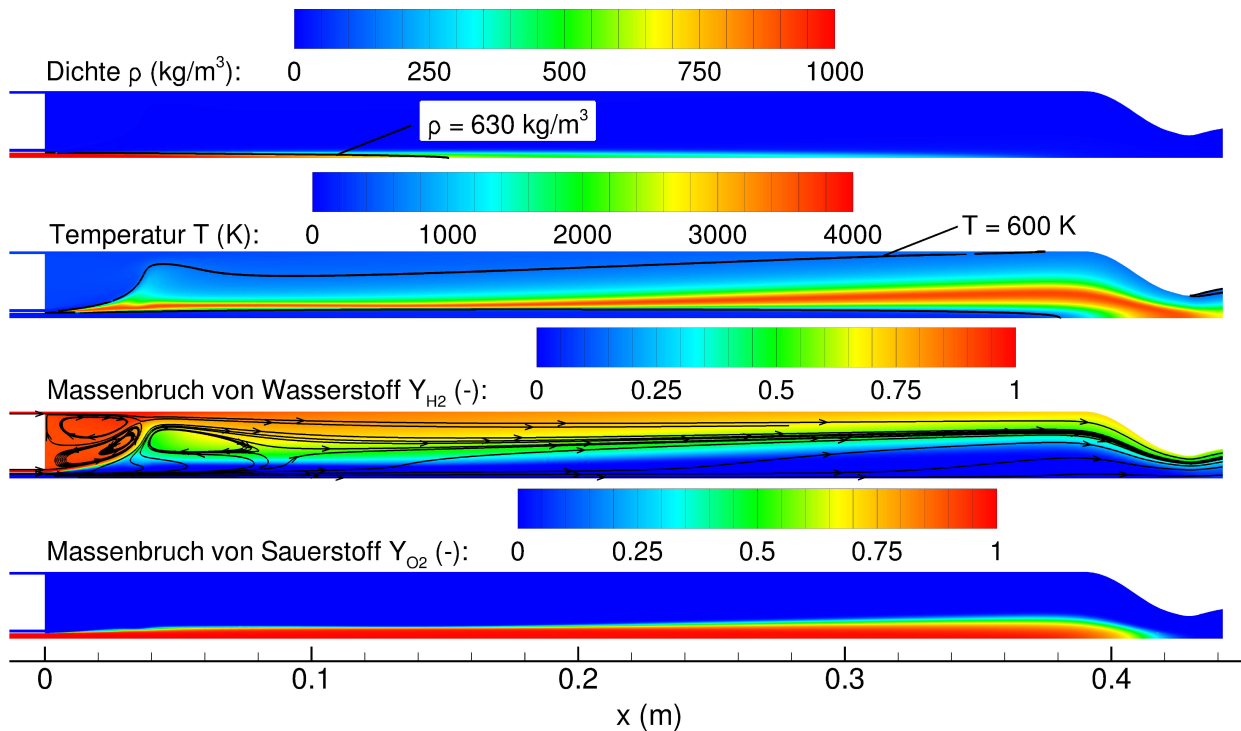
[†] Der Unterschied im Düsenhalsdurchmesser ist möglicherweise auf ungenaue Angaben zurückzuführen.

[‡] Nicht direkt gegeben, sondern über andere Angaben berechnet.

^{*} Wert nicht bekannt. Es wurde der Wert von DLR-1C übernommen.

Tabelle 5.11: Einstellungen für die „DLR“ Testfälle.

Modellierung der Brennkammerwände	adiabat
Reaktionsmechanismus	Ó Conaire et al. (2004)
turbulente Prandtlzahl	0,7
Polynomrekonstruktion / Limiter	2. Ordnung MLP ^{ld}
Zustandsgleichung	SRK

Abbildung 5.22: Konturen der Dichte, der Temperatur, sowie der H_2 - und O_2 -Massenbrüche (von oben nach unten) für eine $q-\omega$ Simulation des „DLR-1C“ Testfalls.

der Brennkammerdruck sind dann im Vergleich zur vollständigen Verbrennung entsprechend geringer.

Zeitlich gemittelte Schattengraphbilder wurden im Experiment aufgenommen, um die Länge L_{LOX} des kalten LOX-Strahls zu ermitteln (Suslov et al. (2016) [211]). Es bestehen jedoch große Unsicherheiten bei der Datengewinnung und -auswertung. Vermutlich aufgrund von Unsymmetrien des Injektors sind die gemittelten Schattengraphbilder beispielsweise unsymmetrisch, während dies in den achsensymmetrischen Simulationen nicht abgebildet werden kann. Die dichte Region ist zudem nicht eindeutig definiert. In den CFD-Simulationen werden daher nur Trends untersucht. Um einen besseren Vergleich zwischen den Simulationen und dem Experiment herzustellen, wurden zur Bestimmung von L_{LOX} in den Simulationen die Dichteisolinien bei 630 kg/m^3 in der $q-\omega$ Simulation und 760 kg/m^3 in der $k-\omega$ SST

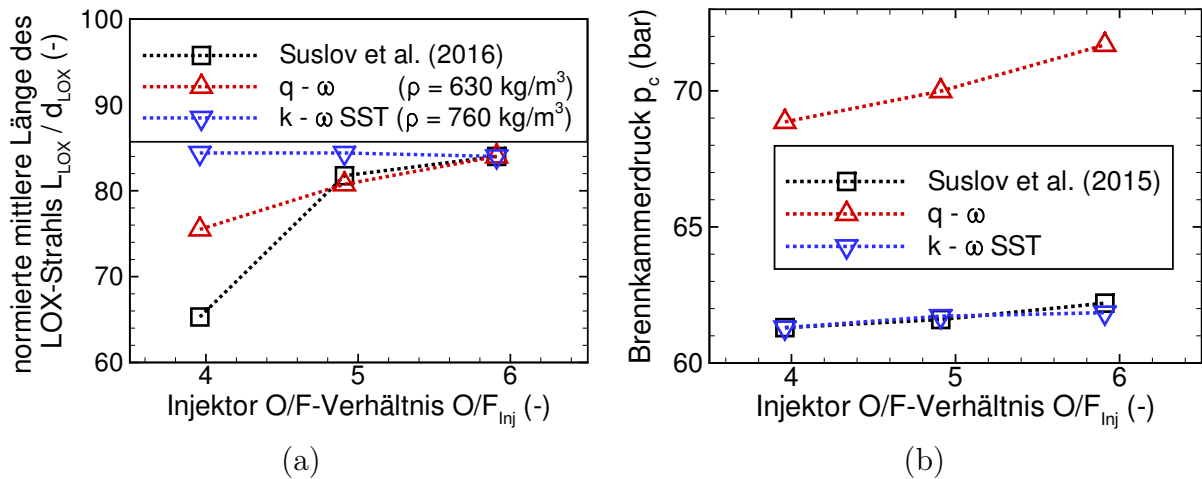


Abbildung 5.23: Vergleich der berechneten und gemessenen mittleren LOX-Strahllängen (normiert mit d_{LOX}) (a) sowie der mittleren Brennkammerdrücke (b) bei variierendem O/F-Verhältnis für die drei Testfälle „DLR-1A“, „DLR-1B“ und „DLR-1C“.

Simulation herangezogen. Die jeweiligen Dichten sind nahe des pseudo-kritischen Punktes (siehe Abb. 5.17(a)) und stimmen gut mit der gemessenen Länge des dichten LOX-Strahls aus dem Experiment bei dem Betriebspunkt „DLR-1A“ mit $O/F = 6$ überein.

Abbildung 5.23(a) zeigt einen Vergleich experimenteller und berechneter gemittelter LOX-Strahllängen, welche mit dem Durchmesser der Sauerstoffzuleitung $d_{LOX} = 4 \text{ mm}$ normiert wurden. Mit dem $q - \omega$ Modell wird der Trend einer ansteigenden LOX-Länge mit zunehmendem O/F-Verhältnis gut reproduziert. Die stärkeren Abweichungen bei $O/F = 4$ sind möglicherweise auch auf die experimentellen Unsicherheiten zurückzuführen. Mit dem $k - \omega$ SST Modell bleibt L_{LOX} nahezu konstant und nimmt mit zunehmendem O/F-Verhältnis sogar leicht ab.

Ein Vergleich der gemessenen und berechneten mittleren Brennkammerdrücke ist in Abb. 5.23(b) abgebildet. Der Trend eines leicht ansteigenden Brennkammerdrucks mit zunehmendem O/F-Verhältnis wird mit beiden Turbulenzmodellen gut erfasst. Während auch die absoluten Werte mit dem $k - \omega$ SST Modell sehr gut mit dem Experiment übereinstimmen, liegen die berechneten Brennkammerdrücke mit dem $q - \omega$ Modell durchgängig bei deutlich höheren Werten. Die Tendenz hin zu deutlich höheren Drücken mit dem $q - \omega$ Modell wurde auch schon im „Mascotte A-60“ Testfall beobachtet. In den Simulationen der BKC-Brennkammer sind die Druckunterschiede zum $k - \omega$ SST Modell noch einmal größer. Dies dürfte daran liegen, dass im Falle der $q - \omega$ Simulationen wesentlich weniger unverbranntes O_2 die Brennkammer verlässt.

Für die drei stationär untersuchten Testbedingungen „DLR-1A“, „DLR-1B“ und „DLR-1C“ liegen für einen quantitativen Vergleich zwischen den Experimenten und Simulationen gemessene Wandtemperaturprofile vor. Diese wurden an zwei unterschiedlichen Positionen entlang des Umfangs ermittelt, was hier mit „obere Wand“ und „untere Wand“ bezeichnet wird. Auf-

grund der schon zuvor erwähnten, mutmaßlichen Unsymmetrien des Injektors weisen auch die Temperaturprofile entlang der oberen und unteren Wand merkliche Unterschiede auf, was in 2D-achsensymmetrischen CFD-Simulationen nicht erfasst werden kann. Ein Vergleich experimenteller und berechneter Wandtemperaturen T_w ist in Abb. 5.24 gegeben. Die Darstellung erfolgt aus Vertraulichkeitsgründen in normierter Darstellung für die Temperatur. Mit dem $q-\omega$ Modell ergibt sich ein durchgängig konsistentes Bild einer etwas zu niedrig vorhergesagten Wandtemperatur für alle drei Lastfälle. Die Ergebnisse mit dem $k-\omega$ SST Modell sind sensitiver bezüglich des O/F-Verhältnisses. Bei O/F = 4 wird die Wandtemperatur deutlich unterschätzt, während sie bei O/F = 5 fast deckungsgleich mit der $q-\omega$ Lösung ist und bei O/F = 6 sogar leicht darüber und damit näher am Experiment liegt. Im Falle von O/F = 4 wird die radiale Aufweitung der Flamme mit dem $k-\omega$ SST Modell im Gegensatz zu den anderen beiden Lastpunkten nicht stark genug vorhergesagt (hier nicht dargestellt). Die Flamme bleibt lange und schmal wie in den $k-\omega$ SST Simulationen des „Mascotte A-60“ Testfalls, wodurch weniger Wärme an die Wand gelangt.

Für die Testbedingungen DLR-2 und DLR-3 mit wesentlich niedrigeren Einspritztemperaturen liegen gemessene spektrale Leistungsdichten der Druckfluktuationen zum Vergleich vor, welche mittels FFT aus dem zeitechten Drucksignal ermittelt wurden. Der Ort der Messungen ist nicht bekannt. In den Simulationen wurde ein Monitorpunkt bei $x = 80$ mm und $r = 10$ mm genommen. Die instationären URANS Simulationen wurden mit dem weniger diffusiven $k-\omega$ Modell berechnet. Mit diesem ergaben sich vor allem im injektornahen Bereich der Brennkammer und in den Rezirkulationszonen stärkere Fluktuationen der Flamme, während sich im hinteren Brennkammerteil weiterhin ein nahezu stationäres Verhalten einstellte. Die im vorderen Bereich erzeugten Fluktuationen in der Wärmefreisetzung erzeugen Druckschwankungen, welche zur Ausbildung von akustischen Moden in der Brennkammer führen. Diese können mittels URANS Simulationen detektiert werden.

Ein Vergleich gemessener und simulierter Leistungsdichten ist für beide Fälle in Abb. 5.25 aufgezeigt. Im Experiment wurden im Bereich bis 9 000 Hz die ersten vier Longitudinalmoden L1 - L4 bei Frequenzen um 1 750 Hz, 3 800 Hz, 5 700 Hz und 7 550 Hz erfasst. Zudem wurden bei Frequenzen knapp oberhalb der L3 Mode Resonanzen detektiert, deren Ursache jedoch nicht bekannt ist. Smith et al. (2002) [200] führen die Resonanz auf eine Interaktion mit der Druckmesseinheit zurück, während in Smith (2007) [201] versucht wird, einen theoretischen Zusammenhang zur Ablösefrequenz der Wirbel des H_2 -Kühlfilms herzustellen. In den CFD-Simulationen wird keine derartige Resonanz bei entsprechender Frequenz erfasst. Die im Experiment festgestellten Druckschwankungen sind für den Fall „DLR-2“ mit den höheren H_2 -Einspritztemperaturen nur sehr gering und deutlich niedriger als im Fall „DLR-3“. Dies ist auch in den Simulationen zu beobachten. Für den wärmeren „DLR-2“ Fall bleibt die Simulation stationärer als im „DLR-3“ Fall und es können nur sehr geringe Druckschwankungen im Bereich der gemessenen L1 und L2 Moden erfasst werden. Im zweiten Fall mit sehr kalten H_2 -Einspritztemperaturen können die gemessenen Longitudinalmoden sehr gut

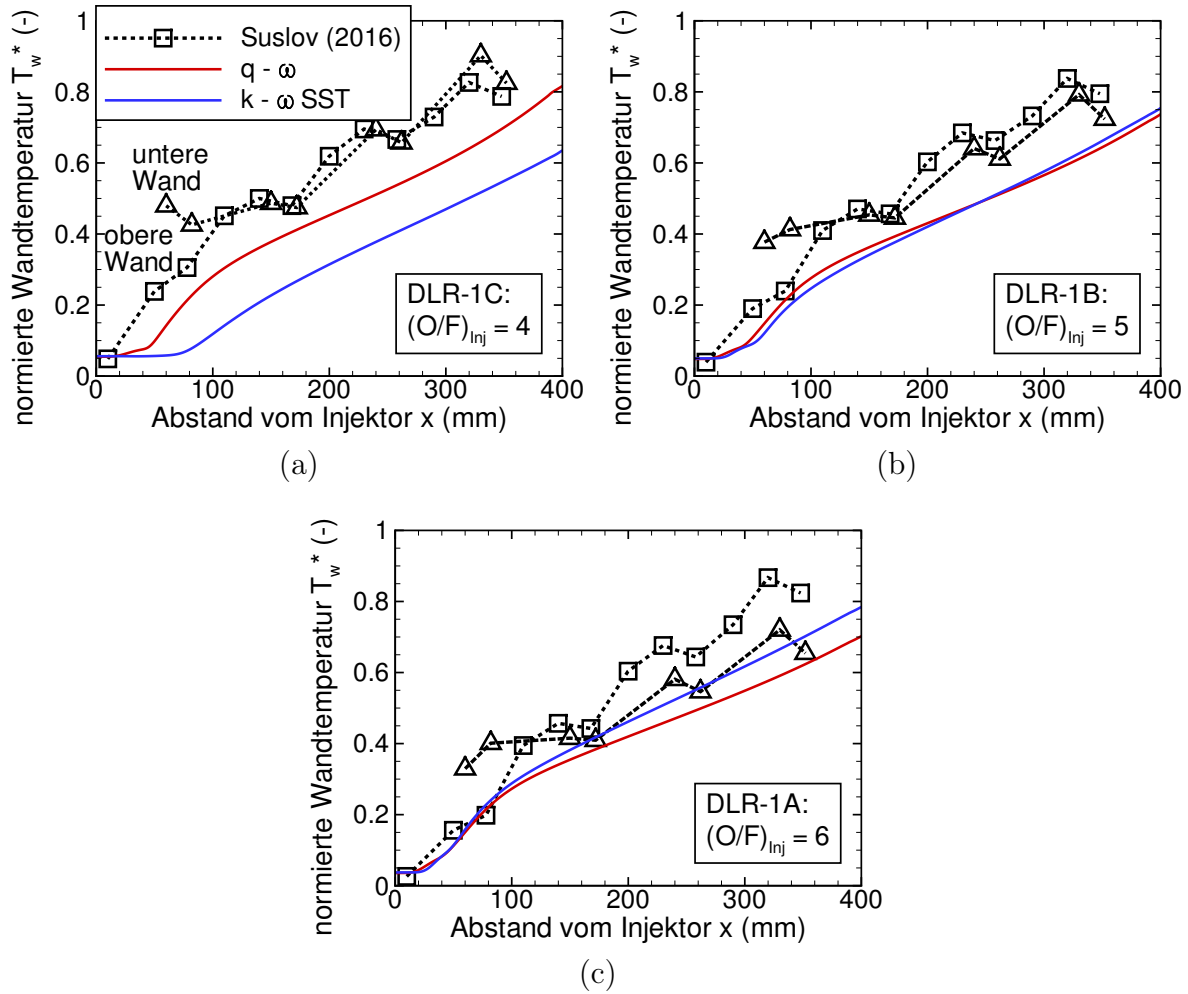


Abbildung 5.24: Vergleich der berechneten und gemessenen normierten Wandtemperaturen bei variierendem O/F-Verhältnis für die drei Testfälle „DLR-1C“ (a), „DLR-1B“ (b) und „DLR-1A“ (c). Experimentelle Daten wurden im Rahmen des DLR-Projekts ProTau von Suslov et al. (2015, 2016) [210, 211] zur Verfügung gestellt.

reproduziert werden. Die simulierten Frequenzen liegen konstant etwas über den gemessenen Werten. Dies könnte aus Unterschieden zwischen Experiment und Simulation hinsichtlich der Flammenfront, der Temperaturen sowie der Durchmischung herrühren, welche mit einer unterschiedlichen mittleren Schallgeschwindigkeit einhergehen würden. Die Amplitude der L2 Mode wird in der Simulation leicht überschätzt, während die anderen Moden in ihrer Stärke etwas unterschätzt werden.

Insgesamt ergibt sich für alle „DLR“ Testfälle eine gute Übereinstimmung mit den Experimenten. Die in den Simulationen der Mascotte-Brennkammer festgestellten Tendenzen können weitestgehend auch in den Simulationen der BKC-Brennkammer beobachtet werden. Jedoch können wiederum nicht alle Details des Experiments mit einem einzigen Setup und Turbulenzmodell reproduziert werden.

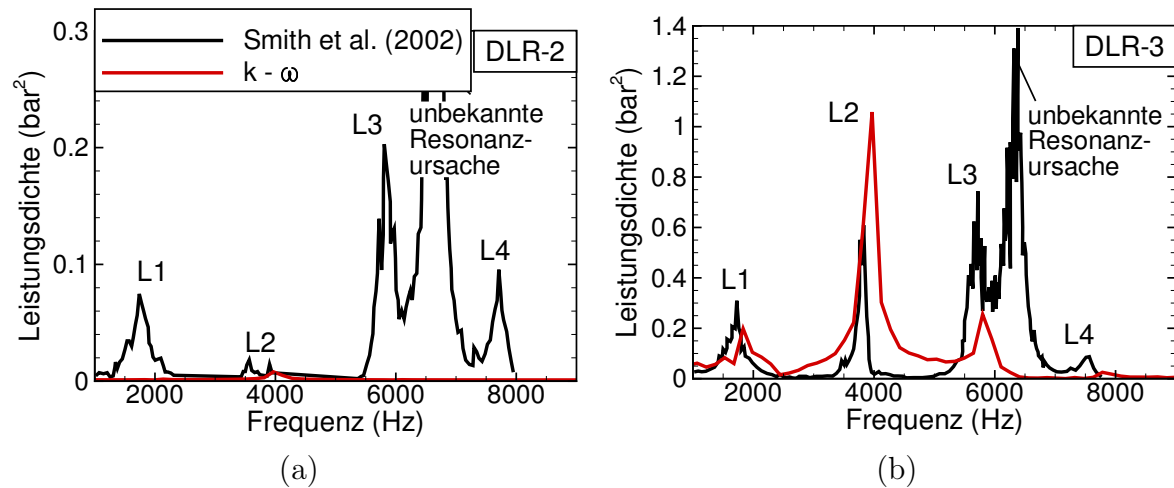


Abbildung 5.25: Vergleich berechneter und gemessener spektraler Leistungsdichten der Druckfluktuationen für die beiden Testfälle „DLR-2“ (a) und „DLR-3“ (b).

6 Zusammenfassung

Im Rahmen dieser Arbeit wurde der CFD-Code TASC3D für die Anwendung auf Strömungen bei sehr hohen Drücken mit trans- und überkritischen Bedingungen erweitert. Dafür musste das numerische Verfahren in mehreren Punkten angepasst und weiterentwickelt werden.

Zur Beschreibung des thermodynamischen Verhaltens realer Fluide wurde die SRK Zustandsgleichung von Soave herangezogen. Wahlweise ist eine Volumenverschiebung für eine verbesserte Vorhersage der Dichte möglich. Für die Simulation nichtreagierender N_2 und CO_2 Strömungen sowie für die H_2 - O_2 Verbrennung in Raketenbrennkammern liefert die SRK Zustandsgleichung eine sehr gute Übereinstimmung mit Daten und Korrelationen aus der Literatur bei geringfügigem Rechenaufwand.

Zur Berechnung aller thermodynamischer Größen und partieller Ableitungen, welche im CFD-Code benötigt werden, wurde der Ansatz von Michelsen und Møllerup verfolgt und erweitert. Dabei werden alle Größen konsistent und exakt mittels fundamentaler thermodynamischer Beziehungen aus partiellen Ableitungen der reduzierten Helmholtz-Residuumsfunktion berechnet. Dieses Vorgehen erlaubt eine effiziente, modulare und leicht zu verifizierende Implementierung, welche auf beliebige Fluide und Zustandsgleichungen anwendbar ist.

Die Berechnung der Stoffwerte für dichte Fluide erfolgte auf Basis der Modelle von Huber und Hanley sowie Riazi und Whitson. Im Gegensatz zu anderen, oft in der Literatur verwendeten Modellen gehen diese bei niedrigen Dichten nahtlos in die zugrundeliegenden Modelle für ideale Gase und Gasgemische über. Zudem wurde für diese Modelle kein inkonsistentes Verhalten im thermodynamisch relevanten Bereich festgestellt. Die Modelle zur Berechnung der Idealgas- und Realgasstoffwerte wurden umfangreich anhand experimenteller Daten und Korrelationen für die untersuchten Bedingungen validiert.

Neben Änderungen der Thermodynamik und Stoffwertberechnung mussten auch das zeitliche und räumliche Diskretisierungsschema modifiziert werden. Für eine Konvergenzbeschleunigung bei niedrigen Machzahlen wird auf eine Prädiktionstechnik gesetzt. Die Berechnung der Eigenwerte sowie der Einträge in den Transformations-, Prädiktionierungs- und Jakobimatrizen wurde entsprechend angepasst, damit deren Gültigkeit auch unter Realgasbedingungen gegeben ist. Im verwendeten räumlichen Diskretisierungsschema AUSM⁺-up musste die Berechnung der Interface-Schallgeschwindigkeit auf den Seiten der Finite-Volumen Zellen geändert werden. In Kombination mit der Prädiktionierung muss bei Verwendung des

AUSM⁺-up Schemas darauf geachtet werden, ähnliche Werte für die Machzahl-Limitierung zu verwenden. Dies gilt unabhängig vom thermodynamischen Zustand auch für ideale Gase. Zur Validierung des implementierten Realgasmoduls wurden jeweils zwei Testfälle mit nicht-reagierender und reagierender Strömung simuliert. Aufgrund der deutlich kürzeren Rechenzeiten kamen vorwiegend achsensymmetrische 2D-RANS Simulationen zum Einsatz. Diese ermöglichten umfangreiche Parameteruntersuchungen und Sensitivitätsanalysen. Zur Erfassung instationärer Phänomene kamen 3D-DDES und achsensymmetrische URANS Rechnungen zum Zuge. Zusammenfassend lässt sich für alle Testfälle sagen, dass mit RANS Simulationen oft sehr zufriedenstellende Ergebnisse erzielt werden. Jedoch können mit einem einzigen Setup und Turbulenzmodell nicht alle Messergebnisse über alle Testfälle hinweg gleich gut reproduziert werden. RANS Simulationen mit dem $q-\omega$ und $k-\omega$ SST Turbulenzmodell bleiben tendenziell stationär. Beide Modelle wirken wesentlich stärker dämpfend als das $k-\omega$ Turbulenzmodell, mit welchem die Strömung auf gleichen, groben Gittern schon zu Instationaritäten neigen kann. Ergebnisse mittels DDES für einen inerten Strahlzerfall sind vielversprechend. Jedoch ist ihr Einsatz insbesondere in reaktiven Strömungen aufgrund der hohen Rechenkosten und -zeiten nur eingeschränkt möglich.

Als erstes wurde ein inerter N₂-Strahl simuliert, welcher transkritisch in eine warme N₂-Umgebung eingespritzt wird und zerfällt. Eine gute Übereinstimmung mit gemessenen axialen Dichteprofilen konnte mittels DDES und RANS Simulationen basierend auf dem $k-\omega$ SST Modell erreicht werden, während mit dem $q-\omega$ und vor allem mit dem $k-\omega$ Modell der Strahlzerfall deutlich zu weit stromab vorhergesagt werden. Eine Analyse des instationären Strömungsfeldes im Falle der DDES bestätigte die Ausbildung von ringähnlichen Wirbelstrukturen stromauf des chaotischen, turbulenten 3D-Zerfalls, was auch bereits in früheren Simulationen beobachtet wurde.

Der zweite inerte Testfall widmete sich der Vorhersage des Wandwärmeübergangs, welche unter anderem essenziell zur Auslegung von Raketenbrennkammern ist. Dafür wurde ein überkritisch und vertikal durchströmtes, beheiztes Rohr betrachtet. Die Interaktion zwischen Turbulenz, Gravitation und Realgaseffekten sorgt für ein sehr komplexes Zusammenspiel, welches so in Raketenbrennkammern in diesem Ausmaß nicht vorkommt, jedoch sehr interessant für die Validierung ist und die Grenzen der RANS Turbulenzmodellierung aufzeigt. Mit keinem der verwendeten RANS Modelle konnte eine sehr gute Übereinstimmung mit dem Experiment erzielt werden, auch wenn das qualitative Verhalten der Strömung und der Wandtemperaturen gut reproduziert wurde.

In den beiden letzten Testfällen wurde die H₂-O₂ Verbrennung in einer Modellraketenbrennkammer mit einem zentralen Koaxialinjektor und quadratischen bzw. runden Querschnitt untersucht. Die geometrischen und operativen Details beider Testfälle sind teilweise ähnlich und es wurden in Simulationen beider Brennkammern übereinstimmende Trends festgestellt. Der Brennkammerdruck wird mit dem $q-\omega$ Modell deutlich höher vorhergesagt als mit dem

k - ω SST Modell, was möglicherweise an einer verstärkten Turbulenzproduktion im Bereich der beschleunigten Strömung in der Düse liegt. Die Länge der Flamme wird mit dem q - ω Modell zudem kürzer und radial diffusiver und damit breiter berechnet. Auch die Länge des LOX-Strahls ist entsprechend kürzer. Vergleiche experimenteller OH*-Emissionsbilder, Wandtemperaturen und LOX-Strahllängen mit Simulationen lieferten oft eine gute qualitative und quantitative Übereinstimmung mit Ergebnissen stationärer RANS Simulationen. Instationäre URANS Simulationen mit dem k - ω Modell konnten experimentelle Frequenzspektren teilweise sehr gut wiedergeben. Alle Longitudinalmoden wurden vor allem bei sehr niedrigen H₂-Einspritztemperaturen und starken Druckfluktuationen im Experiment korrekt erfasst. Bei schwacher akustischer Anregung werden diese in der URANS Simulation größtenteils jedoch weggedämpft. Der Einsatz hochwertiger, aber auch sehr aufwendiger DDES könnte hier weitere Verbesserungen bringen.

Literaturverzeichnis

- [1] ASHGRIZ, N. (Herausgeber) (2011): „Handbook of Atomization and Sprays - Theory and Applications“, Springer New York.
- [2] ASSAEL, M. J.; ASSAEL, J.-A. M.; HUBER, M. L.; PERKINS, R. A.; TAKATA, Y. (2011): „Correlations of the Thermal Conductivity of Normal and Parahydrogen from the Triple Points to 1000 K and up to 100 MPa“, *Journal of Physical Chemistry*, 40 (3), S. 033101-1 – 033101-13.
- [3] BAE, J. H.; YOO, J. Y.; CHOI, H. (2005): „Direct Numerical Simulation of Turbulent Supercritical Flows With Heat Transfer“, *Physics of Fluids*, 17 (10), S. 105104-1 – 105104-24.
- [4] BAE, Y.-Y.; KIM, H.-Y. (2009): „Convective Heat Transfer to CO₂ at a Supercritical Pressure Flowing Vertically Upward in Tubes and an Annular Channel“, *Experimental Thermal and Fluid Science*, 33 (2), S. 329–339.
- [5] BAEHR, H. D. (2005): „Thermodynamik - Grundlagen und technische Anwendungen“, 12. Ausgabe, Springer Verlag, Berlin Heidelberg.
- [6] BANUTI, D. T.; HANNEMANN, K. (2010): „Effect of Injector Wall Heat Flux on Cryogenic Injection“, *AIAA Paper 2010-7139*.
- [7] BANUTI, D. T.; HANNEMANN, V.; HANNEMANN, K.; WEIGAND, B. (2016): „An Efficient Multi-Fluid-Mixing Model for Real Gas Reacting Flows in Liquid Propellant Rocket Engines“, *Combustion Science and Technology*, 168, S. 98–112.
- [8] BASTIEN, L. A. J.; PRICE, P. N.; BROWN, N. J. (2010): „Intermolecular Potential Parameters and Combining Rules Determined from Viscosity Data“, *International Journal of Chemical Kinetics*, 42 (12), S. 713–723.
- [9] BAUM, M.; POINSOT, T. J.; THÉVENIN, D. (1994): „Accurate Boundary Conditions for Multicomponent Reactive Flows“, *Journal of Computational Physics*, 116 (2), S. 247–261.
- [10] BELLAN, J. (2006): „Theory, Modeling and Analysis of Turbulent Supercritical Mixing“, *Combustion Science and Technology*, 178 (1-3), S. 253–281.
- [11] BENAROUS, A.; LIAZID, A. (2009): „H₂-O₂ Supercritical Combustion Modeling Using a CFD Code“, *Thermal Science*, 13 (3), S. 139–152.

- [12] BENMANSOUR, A.; LIAZID, A.; LOGERAIS, P.-O.; DURASTANTI, J.-F. (2016): „A 3D Numerical Study of LO₂/GH₂ Supercritical Combustion in the ONERA-Mascotte Test-Rig Configuration“, *Journal of Thermal Science*, 25 (1), S. 97 – 108.
- [13] BLAZEK, J. (2001): „Computational Fluid Dynamics: Principles and Applications“, Elsevier.
- [14] BLOUQUIN, R.; LEQUETTE, L.: (2001): „The RCM-1 Test Case, A First Attempt to Model a Supercritical Cryogenic Injection Using the CPS Code“, in O. Haidn (Herausgeber): „Proceedings of the 2nd International Workshop on Rocket Combustion Modeling“, S. 69 – 86.
- [15] BRANAM, R.; MAYER, W. (2002): „Length Scales in Cryogenic Injection at Supercritical Pressure“, *Experiments in Fluids*, 33 (3), S. 422–428.
- [16] BRANAM, R.; MAYER, W. (2003): „Characterization of Cryogenic Injection at Supercritical Pressure“, *Journal of Propulsion and Power*, 19 (3), S. 342–355.
- [17] BRANAM, R.; TELAAR, J.; MAYER, W.: (2001): „Simulation of Cryogenic Jet Injection, RCM 1“, in O. Haidn (Herausgeber): „Proceedings of the 2nd International Workshop on Rocket Combustion Modeling“, S. 58 – 68.
- [18] BURKE, M. P.; CHAOS, M.; JU, Y.; DRYER, F. L.; KLIPPENSTEIN, S. J. (2012): „Comprehensive H₂/O₂ Kinetic Model for High-Pressure Combustion“, *International Journal of Chemical Kinetics*, 44 (7), S. 444–474.
- [19] CANDEL, S.; JUNIPER, M.; SINGLA, G.; SCOUFLAIRE, P.; ROLON, C. (2006): „Structure and Dynamics of Cryogenic Flames at Supercritical Pressure“, *Combustion Science and Technology*, 178 (1-3), S. 161–192.
- [20] CHEHROUDI, B.; COHN, R.; TALLEY, D. (2002): „Cryogenic Shear Layers: Experiments and Phenomenological Modeling of the Initial Growth Rate Under Subcritical and Supercritical Conditions“, *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 23 (5), S. 554–563.
- [21] CHEHROUDI, B.; COHN, R.; TALLEY, D.; BADA KHSHAN, A. (2000): „Raman Scattering Measurements in the Initial Region of Sub- and Supercritical Jets“, *AIAA Paper 2000-3392*.
- [22] CHEHROUDI, B.; TALLEY, D.; COY, E. (2002): „Visual Characteristics and Initial Growth Rates of Round Cryogenic Jets at Subcritical and Supercritical Pressures“, *Physics of Fluids*, 14 (2), S. 850–861.
- [23] CHEMKIN (2006): „CHEMKIN Release 4.0.2, Reaction Design: Theory Manual“.
- [24] CHEMKIN (2006): „CHEMKIN Release 4.1, Reaction Design: Input Manual“.

- [25] CHEN, X.; ZHA, G.-C. (2005): „Implicit Application of Non-Reflective Boundary Conditions for the Navier-Stokes Equations in Generalized Coordinates“, *AIAA Paper 2005-0091*.
- [26] CHENG, G. C.; FARMER, R. (2006): „Real Fluid Modeling of Multiphase Flows in Liquid Rocket Engine Combustors“, *Journal of Propulsion and Power*, 22 (6), S. 1373 – 1381.
- [27] CHOI, D.; MERKLE, C. L. (1985): „Application of Time-Iterative Schemes to Incompressible Flow“, *AIAA Journal*, 23 (10), S. 1518–1524.
- [28] CHOI, Y.-H.; MERKLE, C. L. (1993): „The Application of Preconditioning in Viscous Flows“, *Journal of Computational Physics*, 105 (2), S. 207–223.
- [29] CHORIN, A. J. (1967): „A Numerical Method for Solving Incompressible Viscous Flow Problems“, *Journal of Computational Physics*, 2, S. 12–26.
- [30] CHU, X.; LAURIEN, E. (2016): „Direct Numerical Simulation of Heated Turbulent Pipe Flow at Supercritical Pressure“, *Journal of Nuclear Engineering and Radiation Science*, 2 (3).
- [31] CHUNG, T.-H.; AJLAN, M.; LEE, L. L.; STARLING, K. E. (1988): „Generalized Multi-parameter Correlation for Nonpolar and Polar Fluid Transport Properties“, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 27, S. 671–679.
- [32] COAKLEY, T. J. (1992): „Turbulence Modeling for High Speed Flows“, *AIAA Paper 1997-0436*.
- [33] COCLITE, A.; CUTRONE, L.; DE PALMA, P.; PASCAZIO, G. (2015): „Numerical Investigation of High-Pressure Combustion in Rocket Engines Using Flamelet/Progress-Variable Models“, *53rd AIAA Aerospace Sciences Meeting*.
- [34] COLIN, Y.; DENIAU, H.; BOUSSUGE, J.-F. (2011): „A Robust Low Speed Preconditioning Formulation for Viscous Flow Computations“, *Computers & Fluids*, 47 (1), S. 1–15.
- [35] CUTRONE, L. (2009): „Predicting Reactive Flows for Propulsion Applications Using a Flamelet/Progress-Variable Approach“, Dissertation, Italian Aerospace Research Center (CIRA).
- [36] CUTRONE, L.; IHME, M.; HERRMANN, M.: (2006): „Modeling of High-Pressure Mixing and Combustion in Liquid Rocket Injectors“, in P. Moin; N. N. Mansour (Herausgeber): „Proceedings of the Summer Program 2006“, S. 269–281, Center for Turbulence Research, Stanford University.
- [37] DANESH, A. (2003): „Developments in Petroleum Science 47 - PVT and Phase Behaviour of Petroleum Reservoir Fluids“, Elsevier Science B. V.

- [38] DARMOFAL, D. L.; SCHMID, P. J. (1996): „The Importance of Eigenvectors for Local Preconditioners of the Euler Equations“, *Journal of Computational Physics*, 127 (2), S. 346–362.
- [39] DAVIDSON, L. (2011): „An Introduction to Turbulence Models“, *Department of Thermo and Fluid Dynamics, Chalmers University of Technology*.
- [40] DE MEDEIROS, F. E. L.; DE B. ALVES, L. S. (2012): „Stiffness, Sensitivity and Robustness in Low Mach Preconditioned Density-Based Methods“, *AIAA Paper 2012-1113*.
- [41] DEITERS, U. K.; NEICHEL, M.; FRANCK, E. U. (1993): „Prediction of the Thermodynamic Properties of Hydrogen-Oxygen Mixtures from 80 to 373 K and to 100 MPa“, *Berichte der Bunsengesellschaft für physikalische Chemie*, 97 (5), S. 649–657.
- [42] DEPOUTRE, A.; ZURBACH, S.; SAUCEREAU, D.; DUMONT, J. P.; BODÈLE, E.; GÖKALP, I.: (2001): „Rocket Combustion Modelling Test Case RCM-3. Numerical Calculation of MASCOTTE 60 bar Test Case with THESEE“, in O. Haidn (Herausgeber): „Proceedings of the 2nd International Workshop on Rocket Combustion Modeling“, S. 261 – 271.
- [43] EDWARDS, J. R.; FRANKLIN, R. K.; LIOU, M.-S. (2000): „Low-Diffusion Flux-Splitting Methods for Real Fluid Flows with Phase Transition“, *AIAA Journal*, 38 (9), S. 1624–1633.
- [44] ELY, J. F.; HANLEY, H. J. M. (1981): „Prediction of Transport Properties. 1. Viscosity of Fluids and Mixtures“, *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals*, 20, S. 323–332.
- [45] ELY, J. F.; HANLEY, H. J. M. (1983): „Prediction of Transport Properties. 2. Thermal Conductivity of Fluids and Mixtures“, *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals*, 22, S. 90–97.
- [46] FAGHRI, A.; ZHANG, Y. (2006): „Transport Phenomena in Multiphase Systems“, Elsevier Inc.
- [47] FARMER, R.; CHENG, G.; CHEN, Y. S.: (2001): „CFD Simulation of Liquid Rocket Engine Injectors: Test Case RCM-1“, in O. Haidn (Herausgeber): „Proceedings of the 2nd International Workshop on Rocket Combustion Modeling“, S. 48–57.
- [48] FECHTER, S.; KARL, S.; HANNEMANN, V.; HANNEMANN, K. (2017): „Simulation of LOX/GH2 Single Coaxial Injector at High Pressure Conditions“, *AIAA Paper 2017-4765*.
- [49] FERGASON, S. H.; HO, T. L.; ARGROW, B. M.; EMANUEL, G. (2001): „Theory of Producing a Single-Phase Rarefaction Shock Wave in a Shock Tube“, *Journal of Fluid Mechanics*, 445, S. 37–54.

- [50] FERZIGER, J. H.; PERIĆ, M. (2002): „Computational Methods for Fluid Dynamics“, 3. Ausgabe, Springer-Verlag Berlin Heidelberg.
- [51] FREY, K.; MODELL, M.; TESTER, J. W. (2013): „Density-and-Temperature-Dependent Volume Translation for the SRK EOS: 2. Mixtures“, *Fluid Phase Equilibria*, 343, S. 13–23.
- [52] FREY, M.; KNIESNER, B.; KNAB, O. (2011): „Consideration of Real Gas Effects and Condensation in a Spray-Combustion Rocket-Thrust-Chamber Design Tool“, *Progress in Propulsion Physics*, 2, S. 285–296.
- [53] FRIEND, D. G.; RÖDER, H. M. (1985): „Thermal-Conductivity Enhancement Near the Liquid-Vapor Critical Line of Binary Methane-Ethane Mixtures“, *Physical Review A*, 32 (3), S. 1941–1944.
- [54] FULLER, E. N.; ENSLEY, F.; GIDDINGS, J. C. (1969): „Diffusion of Halogenated Hydrocarbons in Helium. The Effect of Structure on Collision Cross Sections“, *The Journal of Physical Chemistry*, 73 (11), S. 3679–3685.
- [55] FULLER, E. N.; SCHETTLER, P. D.; GIDDINGS, J. C. (1966): „A New Method for Prediction of Binary Gas-Phase Diffusion Coefficients“, *Industrial & Engineering Chemistry*, 58 (5), S. 18–27.
- [56] GERLINGER, P. (1995): „Numerische Berechnung turbulenter Verbrennungsvorgänge mit einem impliziten LU-Verfahren“, Dissertation, Universität Stuttgart.
- [57] GERLINGER, P. (2003): „Investigation of an Assumed PDF Approach for Finite-Rate Chemistry“, *Combustion Science and Technology*, 175 (5), S. 841–872.
- [58] GERLINGER, P. (2005): „Numerische Verbrennungssimulation“, Springer-Verlag Berlin Heidelberg.
- [59] GERLINGER, P. (2012): „Multi-Dimensional Limiting for High-Order Schemes Including Turbulence and Combustion“, *Journal of Computational Physics*, 231 (5), S. 2199–2228.
- [60] GERLINGER, P.; MÖBUS, H.; BRÜGGEMANN, D. (2001): „An Implicit Multigrid Method for Turbulent Combustion“, *Journal of Computational Physics*, 167 (2), S. 247–276.
- [61] GERLINGER, P.; NOLD, K.; AIGNER, M. (2010): „Influence of Reaction Mechanisms, Grid Spacing, and Inflow Conditions on the Numerical Simulation of Lifted Supersonic Flames“, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 62 (12), S. 1357–1380.
- [62] GOOS, E.; BURCAT, A.: (2012): „Overview of Thermochemistry and Its Application to Reaction Kinetics“, in H. DaCosta; M. Fan (Herausgeber): „Rate Constant Calculation for Thermal Reactions: Methods and Applications“, S. 3–32, Wiley.

- [63] GÖRGEN, J.; KNAB, O.: (2001): „Application of Astrium’s CryoROC Code to a Single Injector Problem. A Contribution to the RCM-3 Mascotte Test Case (60 bar)“, in O. Haidn (Herausgeber): „Proceedings of the 2nd International Workshop on Rocket Combustion Modeling“, S. 253 – 260.
- [64] GRAY, P.; WRIGHT, P. G. (1961): „The Thermal Conductivity of Mixtures of Nitrogen, Ammonia and Hydrogen“, *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 263 (1313), S. 161–188.
- [65] GUARDONE, A.; ZAMFIRESCU, C.; COLONNA, P. (2010): „Maximum Intensity of Rarefaction Shock Waves for Dense Gases“, *Journal of Fluid Mechanics*, 642, S. 127–146.
- [66] GUEVARA, F. A.; MCINTEER, B. B.; WAGEMAN, W. E. (1969): „High-Temperature Viscosity Ratios for Hydrogen, Helium, Argon, and Nitrogen“, *The Physics of Fluids*, 12 (12), S. 2493–2505.
- [67] GUGGENHEIM, E. A. (1945): „The Principle of Corresponding States“, *The Journal of Chemical Physics*, 13 (7), S. 253–261.
- [68] HABIBALLAH, M.; ORAIN, M.; GRISCH, F.; VINGERT, L.; GICQUEL, P. (2006): „Experimental Studies of High-Pressure Cryogenic Flames on the Mascotte Facility“, *Combustion Science and Technology*, 178 (1-3), S. 101–128.
- [69] HANLEY, H. J.; MCCARTY, R. D.; SENGERS, J. V.: (1974): „Viscosity and Thermal Conductivity Coefficients of Gaseous and Liquid Oxygen“, Technischer Report CR-2440, NASA.
- [70] HASHIMOTO, Y.; OTA, M.; SATO, Y.; OHIZUMI, Y.; INOMATA, H. (2014): „Development of Supercritical Fluid Extraction and Rectification Processes“, *Kagaku Kogaku Ronbunshu*, 40 (6), S. 481–485.
- [71] HÄUSSINGER, P.; LOHMÜLLER, R.; WATSON, A. M.: (2000): „Hydrogen“, in „Ullmann’s Encyclopedia of Industrial Chemistry“, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA.
- [72] HEJRAFAR, K.; KAMALI-MOGHADAM, R. (2012): „Preconditioned Characteristic Boundary Conditions for Solution of the Preconditioned Euler Equations at Low Mach Number Flows“, *Journal of Computational Physics*, 231 (12), S. 4384–4402.
- [73] HENDRICKS, R. C.; GRAHAM, R. W.; HSU, Y. Y.; FRIEDMAN, R.: (1961): „Experimental Heat-Transfer and Pressure Drop of Liquid Hydrogen Flowing Through a Heated Tube“, Technischer Report TN D-765, Lewis Research Center, NASA.

- [74] HENDRICKS, R. C.; GRAHAM, R. W.; HSU, Y. Y.; FRIEDMAN, R.: (1966): „Experimental Heat-Transfer Results for Cryogenic Hydrogen Flowing in Tubes at Subcritical and Supercritical Pressures to 800 Pounds per Square Inch Absolute“, Technischer Report TN D-3095, Lewis Research Center, NASA.
- [75] HENDRICKS, R. C.; SIMONEAU, R. J.; FRIEDMAN, R.: (1965): „Heat-Transfer Characteristics of Cryogenic Hydrogen from 1000 to 2500 Psia Flowing Upward in Uniformly Heated Straight Tubes“, Technischer Report TN D-2977, Lewis Research Center, NASA.
- [76] HERBISON-EVANS, D.: (1994): „Solving Quartics and Cubics for Graphics“, Technischer Report, Universität Sydney.
- [77] HERNING, F.; ZIPPERER, L. (1936): *Gas- und Wasserfach*, 79, S. 49–54.
- [78] HICKEY, J.-P.; IHME, M.: (2013): „Supercritical Mixing and Combustion in Rocket Propulsion“, in „Annual Research Briefs - 2013“, S. 21–36, Center for Turbulence Research, Stanford University.
- [79] HIRSCH, C. (2007): „Numerical Computation of Internal & External Flows“, Band 1, 2. Ausgabe, John Wiley & Sons, Ltd.
- [80] HIRSCHFELDER, J. O.; CURTISS, C. F.; BIRD, R. B. (1954): „Molecular Theory of Gases and Liquids“, John Wiley & Sons, Inc., New York.
- [81] HUANG, P. H. (2011): „Accurate Determination of the Hydrogen-Water Viscosity in PEMFC“, *The Electrochemical Society*, 30 (1), S. 33–40.
- [82] HUBER, M. L.; HANLEY, H. J. M.: (1996): „The Corresponding-States Principle: Dense Fluids“, in J. Millat; J. H. Dymond; C. A. Nieto de Castro (Herausgeber): „Transport Properties of Fluids, Their Correlation, Prediction and Estimation“, S. 283–295, Cambridge University Press.
- [83] HUBER, M. L.; PERKINS, R. A.; LAESECKE, A.; FRIEND, D. G.; SENGERS, J. V.; ASSAEL, M. J.; METAXA, I. N.; VOGEL, E.; MAREŠ, R.; MIYAGAWA, K. (2009): „New International Formulation for the Viscosity of H₂O“, *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 38 (2), S. 101–125.
- [84] HUBER, M. L.; PERKINS, R. A.; LAESECKE, A.; FRIEND, D. G.; SENGERS, J. V.; ASSAEL, M. J.; METAXA, I. N.; VOGEL, E.; MAREŠ, R.; MIYAGAWA, K. (2012): „New International Formulation for the Thermal Conductivity of H₂O“, *Journal of Physical and Chemical Reference Data*, 41 (3), S. 033102–1 – 033102–23.
- [85] HWANG, M.-J.; WHITING, W. B. (1987): „A Corresponding States Treatment for the Viscosity of Polar Fluids“, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 26 (9), S. 1758–1766.

- [86] ITEAN, E. C.; GLUECK, A. R.; SVEHLA, R. A.: „Collision Integrals for a Modified Stockmayer Potential“, Technischer Report NASA TN D-481, NASA.
- [87] IVANOVA, E.; NOLL, B.; AIGNER, M. (2012): „LES-Based Evaluation of the Turbulent Schmidt Numbers for Confined Coaxial Jets“, *AIAA Paper 2012-0452*.
- [88] JARCZYK, M. M. (2013): „Numerische Modellierung von turbulenten Strömungen realer Gasgemische“, Dissertation, Universität der Bundeswehr München.
- [89] JONES, J. E. (1924): „On the Determination of Molecular Fields. II. From the Equation of State of a Gas“, *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 106 (738), S. 463–477.
- [90] JUNIPER, M.; TRIPATHI, A.; SCOUFLAIRE, P.; ROLON, J.-C.; CANDEL, S. (2000): „Structure of Cryogenic Flames at Elevated Pressures“, *Proceedings of the Combustion Institute*, 28 (1), S. 1103 – 1109.
- [91] KEISTLER, P. (2009): „A Variable Turbulent Prandtl and Schmidt Number Model Study for Scramjet Applications“, Dissertation, North Carolina State University.
- [92] KEIZER, J. (1987): „Statistical Thermodynamics of Nonequilibrium Processes“, Springer-Verlag, New York.
- [93] KIM, D. E.; KIM, M.-W. (2011): „Experimental Investigation of Heat Transfer in Vertical Upward and Downward Supercritical CO₂ Flow in a Circular Tube“, *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 32 (1), S. 176–191.
- [94] KIM, K. H.; KIM, C. (2005): „Accurate, Efficient and Monotonic Numerical Methods for Multi-Dimensional Compressible Flows. Part II: Multi-Dimensional Limiting Process“, *Journal of Computational Physics*, 208 (2), S. 570–615.
- [95] KIM, T.; KIM, Y.; KIM, S.-K. (2011): „Numerical Study of Cryogenic Liquid Nitrogen Jets at Supercritical Pressures“, *Journal of Supercritical Fluids*, 56 (2), S. 152–163.
- [96] KINDLER, M. (2014): „Verbrennungssimulation in instationären kompressiblen Strömungen“, Dissertation, Universität Stuttgart.
- [97] KNAB, O.; FREY, M.; GÖRGEN, J.; MAEDING, C.; QUERING, K.; WIEDMANN, D. (2009): „Progress in Combustion and Heat Transfer Modelling in Rocket Thrust Chamber Applied Engineering“, *AIAA Paper 2009-5477*.
- [98] KOSHIZUKA, S.; TAKANO, N.; OKA, Y. (1994): „Numerical Analysis of Deteriorated Phenomena in Heat Transfer to Supercritical Water“, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 38 (16), S. 3077–3084.
- [99] KRAU, C. I. (2014): „Laseroptische Untersuchung turbulenter Strömungsstrukturen beim Wärmeübergang in überkritisches Kohlendioxid nahe des pseudo-kritischen Punktes“, Dissertation, Universität Karlsruhe.

- [100] KURGANOV, V. A.; KAPITL'NY, A. G. (1992): „Velocity and Enthalpy Fields and Eddy Diffusivities in a Heated Supercritical Fluid Flow“, *Experimental Thermal and Fluid Science*, 5 (4), S. 465–478.
- [101] KURGANOV, V. A.; ZIEGARNIK, Y. A. (2005): „Results of Studying of Turbulent Heat Transfer Deterioration in Channels and their Application in Practical Calculations of Heat Transfer and Pressure Drop of Supercritical Pressure Coolants“, *NURETH-11*.
- [102] LAL, B.; SUBRAHMANYAM, N.; HEMNE, P. S. (2010): „Heat Thermodynamics and Statistical Physics“, Brij Lal & N. Subrahmanyam.
- [103] LAUNDER, B. E.: (1991): „Current Capabilities for Modelling Turbulence in Industrial Flows“, in R. V. A. Oliemans (Herausgeber): „Computational Fluid Dynamics for the Petrochemical Process Industry“, S. 37–59, Springer Netherlands.
- [104] LEACHMAN, J. W.; JACOBSEN, R. T.; PENONCELLO, S. G.; LEMMON, E. W. (2009): „Fundamental Equations of State for Parahydrogen, Normal Hydrogen, and Orthohydrogen“, *Journal of Physical Chemistry*, 38 (3), S. 721–748.
- [105] LEE, D. (1996): „Local Preconditioning of the Euler and Navier-Stokes Equations“, Dissertation, University of Michigan.
- [106] LEE, D. (1998): „Design Criteria for Local Euler Preconditioning“, *Journal of Computational Physics*, 144 (2), S. 423–459.
- [107] LEE, D. (1998): „The Design of Local Navier-Stokes Preconditioning for Compressible Flow“, *Journal of Computational Physics*, 144 (2), S. 460–483.
- [108] LEE, H. (1990): „Generalized Treatment of Thermal Conductivity Enhancement in the Critical Region“, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 29 (3), S. 488–494.
- [109] LEE, S.-H. (2005): „Convergence Characteristics of Preconditioned Euler Equations“, *Journal of Computational Physics*, 208 (1), S. 266–288.
- [110] LEE, S.-H. (2007): „Cancellation Problem of Preconditioning Method at Low Mach Numbers“, *Journal of Computational Physics*, 225 (2), S. 1199–1210.
- [111] LEE, S.-H. (2012): „Effects of Condition Number on Preconditioning for Low Mach Number Flows“, *Journal of Computational Physics*, 231 (10), S. 4001–4014.
- [112] LEGRAND, B.; DURAND, P.; VUILLERMOZ, P.: (2001): „Test Case RCM-3 Using CPS“, in O. Haidn (Herausgeber): „Proceedings of the 2nd International Workshop on Rocket Combustion Modeling“, S. 239–252.
- [113] LELAND, T. W.; CHAPPELEAR, P. S. (1968): „The Corresponding States Principle: A Review of Current Theory and Practice“, *Industrial & Engineering Chemistry*, 60 (7), S. 15–43.

- [114] LEMMON, E. W.; HUBER, M. L.; MCLINDEN, M. O. (2013): „NIST Standard Reference Database 23: Reference Fluid Thermodynamic and Transport Properties - REFPROP, Version 9.1“. National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg.
- [115] LEMMON, E. W.; JACOBSEN, R. T. (2004): „Viscosity and Thermal Conductivity Equations for Nitrogen, Oxygen, Argon, and Air“, *International Journal of Thermophysics*, 25 (1), S. 21–69.
- [116] LEMPKE, M.; KELLER, R.; GERLINGER, P. (2015): „Influence of Spatial Discretization and Unsteadiness on the Simulation of Rocket Combustors“, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 79 (9), S. 437–455.
- [117] LEY, W.; WITTMANN, K.; HALLMANN, W. (2011): „Handbuch der Raumfahrttechnik“, 4. Ausgabe, Carl Hanser Verlag GmbH & Co. KG.
- [118] LI, H.-G.; ZONG, N.; LU, X.-Y.; YANG, V. (2012): „A Consistent Characteristic Boundary Condition for General Fluid Mixture and Its Implementation in a Preconditioning Scheme“, *Advances in Applied Mathematics and Mechanics*, 4 (1), S. 72–92.
- [119] LI, J. Z.; ZHAO, Z.; KAZAKOV, A.; DRYER, F. L. (2004): „An Updated Comprehensive Kinetic Model of Hydrogen Combustion“, *International Journal of Chemical Kinetics*, 36, S. 566–575.
- [120] LI, K.; ZHOU, X.; TU, R.; XIE, Q.; JIANG, X. (2014): „The Flow and Heat Transfer Characteristics of Supercritical CO₂ Leakage From a Pipeline“, *Energy*, 71, S. 665–672.
- [121] LIAN, C.; XIA, G.; MERKLE, C. L. (2009): „Impact of Source Terms on Reliability of CFD Algorithms“, *AIAA Paper 2009-4142*.
- [122] LIN, Y.-L.; BIENKOWSKI, P. R.; SHAH, V. M.; CHOCHRAN, H. D. (1996): „Extension of a Generalized Quartic Equation of State to Pure Polar Fluids“, *American Institute of Chemical Engineers*, 42 (2), S. 562–570.
- [123] LIOU, M.-S. (1996): „A Sequel to AUSM: AUSM⁺“, *Journal of Computational Physics*, 129 (2), S. 364–382.
- [124] LIOU, M.-S. (2006): „A Sequel to AUSM, Part II: AUSM⁺-up for All Speeds“, *Journal of Computational Physics*, 214 (1), S. 137–170.
- [125] LOCKE, J. M.; LANDRUM, D. B. (2008): „Study of Heat Transfer Correlations for Supercritical Hydrogen in Regenerative Cooling Channel“, *Journal of Propulsion and Power*, 24 (1), S. 94–103.
- [126] LÖWENBERG, M. F. (2007): „Wärmeübergang von Wasser in vertikalen Rohrströmungen bei überkritischem Druck“, Dissertation, Universität Stuttgart.

- [127] MA, P. C.; BRAVO, L.; IHME, M.: (2014): „Supercritical and Transcritical Real-Fluid Mixing in Diesel Engine Applications“, in P. Moin; J. Urzay (Herausgeber): „Proceedings of the Summer Program 2014“, S. 99–108, Center for Turbulence Research, Stanford University.
- [128] MASATSUKA, K. (2013): „I Do Like CFD“, Band 1, 2. Ausgabe.
- [129] MASON, E. A.; MONCHICK, L. (1962): „Transport Properties of Polar Gas Mixtures“, *The Journal of Chemical Physics*, 36 (10), S. 2746–2757.
- [130] MASQUELET, M. M. (2013): „Large-Eddy Simulations of High-Pressure Shear Coaxial Flows Relevant for H₂-O₂ Rocket Engines“, Dissertation, Georgia Institute of Technology.
- [131] MATHUR, S.; TONDON, P. K.; SAXENA, S. C. (1967): „The Thermal Conductivity of Binary, Ternary and Quaternary Mixtures of Rare Gases“, *Molecular Physics*, 12 (6), S. 569–579.
- [132] MAYER, W.; TAMURA, H. (1996): „Propellant Injection in a Liquid Oxygen/Gaseous Hydrogen Rocket Engine“, *Journal of Propulsion and Power*, 12 (6), S. 1137–1147.
- [133] MAYER, W.; TELAAR, J.; BRANAM, R.; SCHNEIDER, G.; HUSSONG, J. (2003): „Raman Measurements of Cryogenic Injection at Supercritical Pressure“, *Heat and Mass Transfer*, 39 (8), S. 709–719.
- [134] MAYER, W. O. H.; SCHIK, A. H. A.; VIELLE, B.; CHAUVEAU, C.; GÖKALP, I.; TALLEY, D. G.; WOODWARD, R. D. (1998): „Atomization and Breakup of Cryogenic Propellants Under High-Pressure Subcritical and Supercritical Conditions“, *Journal of Propulsion and Power*, 14 (5), S. 835–842.
- [135] MCBRIDE, B. J.; GORDON, S.: (1992): „Computer Program for Calculating and Fitting Thermodynamic Functions“, Technischer Report RP 1271, NASA.
- [136] MCBRIDE, B. J.; GORDON, S.; RENO, M. A.: (2001): „Thermodynamic Data for Fifty Reference Elements“, Technischer Report TP 3287/REV1, NASA.
- [137] MEHL, J. B.; HUBER, M. L.; HARVEY, A. H. (2010): „Ab Initio Transport Coefficients of Gaseous Hydrogen“, *International Journal of Thermophysics*, 31 (4), S. 740–755.
- [138] MEISTER, A. (2011): „Numerik linearer Gleichungssysteme“, 4. Ausgabe, Vieweg + Teubner Verlag, Wiesbaden.
- [139] MENG, H.; YANG, V. (2003): „A Unified Treatment of General Fluid Thermodynamics and Its Application to a Preconditioning Scheme“, *Journal of Computational Physics*, 189, S. 277–304.

- [140] MENTER, F.; CARREGAL FERREIRA, J.; ESCH, T.; KONNO, B. (2003): „The SST Turbulence Model with Improved Wall Treatment for Heat Transfer Predictions in Gas Turbines“, *Proceedings of the International Gas Turbine Congress (Tokyo)*.
- [141] MENTER, F. R. (1993): „Zonal Two Equation k - ω Turbulence Models for Aerodynamic Flows“, *AIAA Paper 1993-2906*.
- [142] MESSERSCHMID, E.; FASOULAS, S. (2011): „Raumfahrtsysteme“, 4. Ausgabe, Springer-Verlag Berlin Heidelberg.
- [143] MEYBERG, K.; VACHENAUER, P. (1990): „Höhere Mathematik 1“, Springer-Verlag Berlin Heidelberg.
- [144] MICHELSEN, J. M., M. L. MOLLERUP (2007): „Thermodynamic Models: Fundamentals & Computational Aspects“, 2. Ausgabe, Tie-Line Publications.
- [145] MICHELSEN, M. L. (1982): „The Isothermal Flash Problem. Part I. Stability“, *Fluid Phase Equilibria*, 9, S. 1–19.
- [146] MICHELSEN, M. L. (1982): „The Isothermal Flash Problem. Part II. Phase-Split Calculation“, *Fluid Phase Equilibria*, 9, S. 21–40.
- [147] MILLER, R. S.; HARSTAD, K. G.; BELLAN, J. (2001): „Direct Numerical Simulations of Supercritical Fluid Mixing Layers Applied to Heptane–Nitrogen“, *Journal of Fluid Mechanics*, 436, S. 1–39.
- [148] MONCHICK, L.; MASON, E. A. (1961): „Transport Properties of Polar Gases“, *The Journal of Chemical Physics*, 35, S. 1676–1697.
- [149] MORAN, M. J.; SHAPIRO, H. N. (2006): „Fundamentals of Engineering Thermodynamics“, 5. Ausgabe, John Wiley & Sons, Inc.
- [150] MOURITS, F. M.; RUMMENS, H. A. (1977): „A Critical Evaluation of Lennard-Jones and Stockmayer Potential Parameters and of Some Correlation Methods“, *Canadian Journal of Chemistry*, 55 (16), S. 3007–3020.
- [151] MUDRABOYINA, B. P.; FU, D.; JESSOP, P. G. (2015): „Supercritical Fluid Rectification of Lignin Microwave-Pyrolysis Oil“, *Green Chemistry*, 17 (1), S. 169–172.
- [152] MÜLLER, H.; NIEDERMEIER, C. A.; MATHEIS, J.; PFITZNER, M.; HICKEL, S. (2016): „Large-Eddy Simulation of Nitrogen Injection at Trans- and Supercritical Conditions“, *Physics of Fluids*, 28 (1).
- [153] MUZNY, C. D.; HUBER, M. L.; KAZAKOV, A. F. (2013): „Correlation for the Viscosity of Normal Hydrogen Obtained from Symbolic Regression“, *Journal of Chemical & Engineering Data*, 58 (4), S. 969–979.

- [154] NEMATI, H.; PATEL, A.; BOERSMA, B.; PECNIK, R. (2013): „Direct Numerical Simulation of Turbulent Flow with Supercritical Fluid in a Heated Pipe“, *International Symposium on Turbulence and Shear Flow Phenomena (TSFP-8)*.
- [155] NEUFELD, P. D.; JANZEN, A. R.; AZIZ, R. A. (1972): „Empirical Equations to Calculate 16 of the Transport Collision Integrals $\Omega^{(l,s)*}$ for the Lennard-Jones (12-6) Potential“, *The Journal of Chemical Physics*, 57 (3), S. 1100–1102.
- [156] NIINO, M.; KUMAKAWA, N.; YATSUYANAGI, N.; SUZUKI, A. (1982): „Heat Transfer Characteristics of Liquid Hydrogen as a Coolant for the LO₂/LH₂ Rocket Thrust Chamber with the Channel Wall Construction“, *AIAA Paper 1982-1107*.
- [157] NIST: „<http://trc.nist.gov/tde.html>“.
- [158] Ó CONAIRE, M.; CURRAN, H. J.; SIMMIE, J. M.; PITZ, W. J.; WESTBROOK, C. K. (2004): „A Comprehensive Modeling Study of Hydrogen Oxidation“, *International Journal of Chemical Kinetics*, 36 (11), S. 603–622.
- [159] O’CONNELL, J. P.; HAILE, J. M. (2005): „Thermodynamics: Fundamentals for Applications“, Cambridge University Press, New York.
- [160] OEFELEIN, J. C. (2002): „Large Eddy Simulation of a Shear-Coaxial LOX-H₂ Jet at Supercritical Pressure“, *AIAA Paper 2002-4030*.
- [161] OEFELEIN, J. C. (2006): „Mixing and Combustion of Cryogenic Oxygen-Hydrogen Shear-Coaxial Jet Flames at Supercritical Pressure“, *Combustion Science and Technology*, 178 (1-3), S. 229–252.
- [162] OKONG’O, N.; BELLAN, J. (2002): „Consistent Boundary Conditions for Multicomponent Real Gas Mixtures Based on Characteristic Waves“, *Journal of Computational Physics*, 176 (2), S. 330–344.
- [163] OKONG’O, N.; BELLAN, J. (2003): „Real-Gas Effects on Mean Flow and Temporal Stability of Binary-Species Mixing Layers“, *AIAA Journal*, 41 (12), S. 2429–2443.
- [164] PALKO, D.; ANGLART, H. (2008): „Numerical Study of Heat Transfer Deterioration“, *International Students Workshop on High Performance Light Water Reactors*.
- [165] PARK, T. S. (2012): „LES and RANS Simulations of Cryogenic Liquid Nitrogen Jets“, *Journal of Supercritical Fluids*, 72, S. 232–247.
- [166] PÉNELOUX, A.; RAUZY, E.; FREZE, R. (1982): „A Consistent Correction for Redlich-Kwong-Soave Volumes“, *Fluid Phase Equilibria*, 8, S. 7–23.
- [167] PENG, D.-Y.; ROBINSON, D. B. (1976): „A New Two-Constant Equation of State“, *Industrial & Engineering Chemistry Fundamentals*, 15 (1), S. 59–63.
- [168] PETERS, N. (2010): „Technische Verbrennung“, RWTH Aachen.

- [169] PETIT, X.; RIBERT, G.; LARTIGUE, G.; DOMINGO, P. (2013): „Large-Eddy Simulation of Supercritical Fluid Injection“, *Journal of Supercritical Fluids*, 84, S. 61–73.
- [170] PETUKHOV, B. S.; POLYAKOV, A. F. (1988): „Heat Transfer in Turbulent Mixed Convection“, Hemisphere, New York.
- [171] PIS'MENNY, E. N.; RAZUMOVSKIY, V. G.; MAEVSKIY, E. M.; KOLOSKOV, A. E.; PIORO, I. L. (2006): „Heat Transfer to Supercritical Water in Gaseous State or Affected by Mixed Convection in Vertical Tubes“, *Proceedings of ICONE14, International Conference on Nuclear Engineering*.
- [172] PITZER, K.; LIPPMANN, D. Z.; CURL JR., R. F.; HUGGINS, C. M.; PETERSEN, D. E. (1955): „The Volumetric and Thermodynamic Properties of Fluids. II. Compressibility Factor, Vapor Pressure and Entropy of Vaporization“, *Journal of the American Chemical Society*, 77 (13), S. 3433–3440.
- [173] PIZZARELLI, M. (2007): „Modeling of Cooling Channel Flow in Liquid-Propellant Rocket Engines“, Dissertation, Università degli Studi di Roma "La Sapienza".
- [174] POHL, S.; JARCZYK, M.; PFITZNER, M.; ROGG, B. (2013): „Real Gas CFD Simulations of Hydrogen / Oxygen Supercritical Combustion“, *Progress in Propulsion Physics*, 4, S. 583–614.
- [175] POINSOT, T. J.; LELE, S. K. (1992): „Boundary Conditions for Direct Simulations of Compressible Viscous Flows“, *Journal of Computational Physics*, 101 (1), S. 104–129.
- [176] POLING, B. E.; PRAUSNITZ, J. M.; O'CONNELL, J. P. (2001): „Properties of Gases and Liquids“, 5. Ausgabe, McGraw-Hill Education, New York.
- [177] POPE, S. B. (2000): „Turbulent Flows“, Cambridge University Press.
- [178] POSCHNER, M.-M.; PFITZNER, M.: „CFD-Simulation of the Injection and Combustion of LOX and H₂ at Supercritical Pressures“, *AIAA Paper 2010-1144*.
- [179] POSCHNER, M.-M.; PFITZNER, M. (2009): „CFD-Simulation of Supercritical LOX/GH₂ Combustion Considering Consistent Real Gas Thermodynamics“, *4th European Combustion Meeting*.
- [180] PRIVAT, R.; GAILLOCHET, F.; JAUBERT, J.-N. (2012): „Testing the Ability of Various Equations of State to Reproduce High-Pressure Isotherm Crossings in the (α ,P) Plane“, *Fluid Phase Equilibria*, 327, S. 45–57.
- [181] PROSPERETTI, A.; TRYGGVASON, G. (2007): „Computational Methods for Multiphase Flow“, Cambridge University Press, New York.
- [182] REDLICH, O.; KWONG, J. N. S. (1949): „On the Thermodynamics of Solutions. V. An Equation of State. Fugacities of Gaseous Solutions“, *Chemical Reviews*, 44 (1), S. 233–244.

- [183] RIAZI, M. R.; WHITSON, C. H. (1993): „Estimating Diffusion Coefficients of Dense Fluids“, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 32, S. 3081–3088.
- [184] ROE, P. L. (1986): „Characteristic-Based Schemes for the Euler Equations“, *Annual Review of Fluid Mechanics*, 18 (1), S. 337–365.
- [185] ROELOFS, F.: (2004): „CFD Analysis of Heat Transfer to Supercritical Water Flowing Vertically Upward in a Tube“, Technischer Report, NRG Report 21353/04.60811/P.
- [186] RUAN, B.; MENG, H. (2012): „Supercritical Heat Transfer of Cryogenic-Propellant Methane in Rectangular Engine Cooling Channels“, *Journal of Thermodynamics and Heat Transfer*, 26 (2), S. 313–321.
- [187] RUIZ, A. (2012): „Simulations Numériques Instationnaires de la Combustion Turbulente et Transcritique Dans les Moteurs Cryotechniques“, Dissertation, Universität Toulouse.
- [188] SATTELMAYER, T. (2007): „Technische Thermodynamik: Skriptum zur Vorlesung Thermodynamik I - Energielehre und Stoffverhalten“, TU München.
- [189] SAXENA, S. C.; SAXENA, V. K. (1970): „Thermal Conductivity Data for Hydrogen and Deuterium in the Range 100-1100 °C“, *Journal of Physics A: General Physics*, 3 (3), S. 309–320.
- [190] SCHMITT, T.; SELLE, L.; RUIZ, A.; CUENOT, B. (2010): „Large-Eddy Simulation of Supercritical-Pressure Round Jets“, *AIAA Journal*, 48 (2), S. 2133–2144.
- [191] SCHULENBERG, T.; STARFLINGER, J.; AKSAN, N.; BITTERMANN, D.; HEIKINHEIMO, L.: (2006): „Supercritical Water Reactor Research in the GIF context: Current Status and Future Prospects with Emphasis on European Activities“, in G. van Goethem; P. Manolatos; M. Hugon; V. Bhatnagar; S. Casalta; M. Deffrennes (Herausgeber): „FISA 2006 EU Research and Training in Reactor Systems“, European Commission Euratom Framework Programme 2002-2006.
- [192] SEIDL, M.; AIGNER, M.; KELLER, R.; GERLINGER, P. (2016): „CFD Simulations of Turbulent Nonreacting and Reacting Flows for Rocket Engine Applications“, *The Journal of Supercritical Fluids*, 121, S. 63–77.
- [193] SHITSMAN, M. E. (1963): „Impairment of the Heat Transmission at Supercritical Pressures“, *High Temperatures*, 1, S. 237–244.
- [194] SHUEN, J.-S. (1992): „Upwind Differencing and LU Factorization for Chemical Non-Equilibrium Navier-Stokes Equations“, *Journal of Computational Physics*, 99 (2), S. 233–250.
- [195] SHUEN, J.-S.; CHEN, K.-H.; CHOI, Y. (1993): „A Coupled Implicit Method for Chemical Non-Equilibrium Flows at All Speeds“, *Journal of Computational Physics*, 106 (2), S. 306–318.

- [196] SHUR, M.; SPALART, P.; STRELETS, M.; TRAVIN, A. (2008): „A Hybrid RANS-LES Approach with Delayed-DES and Wall-Modelled LES Capabilities“, *International Journal of Heat and Fluid Flow*, 29 (6), S. 1638–1649.
- [197] SIMEONI, G. G.; BRYK, T.; GORELLI, F. A.; KRISCH, M.; RUOCCO, G.; SANTORO, M.; SCOPIGNO, T. (2010): „The Widom Line as the Crossover Between Liquid-Like and Gas-Like Behaviour in Supercritical Fluids“, *Nature Physics*, 6, S. 503–507.
- [198] SIMSONT, Y. H.; GERLINGER, P. (2016): „High Order Numerical Simulation of the Thermal Load on a Lobed Strut Injector for Scramjet Applications“, *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, 82 (7), S. 417–436.
- [199] SMAGORINSKY, J. (1963): „General Circulation Experiments with the Primitive Equations I. - The Basic Experiment“, *Monthly Weather Review*, 93 (3), S. 99–164.
- [200] SMITH, J.; KLIMENKO, D.; CLAUSS, W.; MAYER, W. (2002): „Supercritical LOX/Hydrogen Rocket Combustion Investigations Using Optical Diagnostics“, *AIAA Paper 2002-4033*.
- [201] SMITH, J. J. (2007): „High Pressure Rocket Engine Combustion“, Dissertation, The University of Adelaide.
- [202] SOAVE, G. (1972): „Equilibrium Constants from a Modified Redlich-Kwong Equation of State“, *Chemical Engineering Science*, 27 (6), S. 1197–1203.
- [203] SPALART, P.; ALLMARAS, S. (1992): „A One Equation Turbulence Model for Aerodynamic Flows“, *AIAA Paper 1992-0439*.
- [204] SPALART, P.; DECK, S.; SHUR, M.; SQUIRES, K.; STRELETS, M.; TRAVIN, A. (2006): „A New Version of Detached-Eddy Simulation, Resistant to Ambiguous Grid Densities“, *Theoretical Computational Fluid Dynamics*, 20 (3), S. 181–195.
- [205] SPALART, P.; JOU, W.-H.; STRELETS, M.; ALLMARAS, S. (1997): „Comments on the Feasibility of LES for Wings, and on a Hybrid RANS/LES Approach“, *Advances in DNS/LES, Proceedings of the First AFOSR International Conference on DNS/LES*.
- [206] STEPHAN, P.; SCHABER, K.; STEPHAN, K.; MAYINGER, F. (2010): „Thermodynamik: Grundlagen und technische Anwendungen - Band 2: Mehrstoffsysteme und chemische Reaktionen“, 15. Ausgabe, Springer Verlag, Berlin Heidelberg.
- [207] STIEL, G., L. I. THODOS (1964): „The Thermal Conductivity of Nonpolar Substances in the Dense Gaseous and Liquid Regions“, *American Institute of Chemical Engineers*, 10 (1), S. 26–30.
- [208] STOLL, P. (2001): „Entwicklung eines parallelen Mehrgitterverfahrens zur Simulation der Verbrennung in kompressiblen und inkompressiblen Strömungen“, Dissertation, Universität Stuttgart.

- [209] STREETT, W. B.; CALADO, J. C. G. (1978): „Liquid-Vapour Equilibrium for Hydrogen + Nitrogen at Temperatures from 63 to 110 K and Pressures to 57 MPa“, *Journal of Chemical Thermodynamics*, 10, S. 1089–1100.
- [210] SUSLOV, D. I.; HARDI, J. S.; KNAPP, B.; OSCHWALD, M. (2015): „Hot-Fire Testing of LOX/H₂ Single Coaxial Injector at High Pressure Conditions with Optical Diagnostics“, *6th European Conference for Aeronautics and Space Science (EUCASS)*.
- [211] SUSLOV, D. I.; HARDI, J. S.; KNAPP, B.; OSCHWALD, M. (2016): „Optical Investigation of the LOX-Jet Disintegration Processes at High Pressure Conditions in a LOX/H₂ Single Coaxial Injector Combustion Chamber“, *Space Propulsion Conference Paper SP2016 3124815*.
- [212] TAKAHASHI, S. (1974): „Preparation of a Generalized Chart for the Diffusion Coefficients of Gases at High Pressures“, *Journal of Chemical Engineering of Japan*, 7 (6), S. 417–420.
- [213] TELAAR, J.; SCHNEIDER, G.; HUSSONG, J.; MAYER, W.: (2001): „Cryogenic Jet Injection: Description of Test Case RCM-1“, in O. Haidn (Herausgeber): „Proceedings of the 2nd International Workshop on Rocket Combustion Modeling“, S. 42 – 47.
- [214] TERASHIMA, H.; KOSHI, M. (2013): „Strategy for Simulating Supercritical Cryogenic Jets Using High-Order Schemes“, *Computers & Fluids*, 85, S. 39–46.
- [215] THOMAS, J. L.; ZURBACH, S.: (2001): „Presentation of Test Case RCM-3: Supercritical Spray Combustion at 60 bar“, in O. Haidn (Herausgeber): „Proceedings of the 2nd International Workshop on Rocket Combustion Modeling“, S. 232 – 238.
- [216] THURSTON, R. S.: (1964): „Pressure Oscillations Induced by Forced Convection Heat Transfer to Two-Phase and Supercritical Hydrogen“, Technischer Report, Los Alamos Scientific Laboratory, University of California Los Alamos.
- [217] TRAVIN, A.; SHUR, M.; STRELETS, M.; SPALART, P. (2004): „Physical and Numerical Upgrades in the Detached-Eddy Simulation of Complex Turbulent Flows“, *Advances in LES of Complex Flows*, 65 (5), S. 239–254.
- [218] TURKEL, E. (1992): „Review of Preconditioning Methods for Fluid Dynamics“, *Applied Numerical Mathematics*, 12 (1), S. 257–284.
- [219] TURKEL, E. (1999): „Preconditioning Techniques in Computational Fluid Dynamics“, *Annual Review of Fluid Mechanics*, 31 (1), S. 385–416.
- [220] TURKEL, E.; VATSA, V. N. (2010): „Local Preconditioners for Steady and Unsteady Flow Applications“, *ESAIM: Mathematical Modelling and Numerical Analysis*, 39 (3), S. 515–535.

- [221] URBANO, A.; NASUTI, F. (2012): „Parametric Analysis of Heat Transfer to Supercritical-Pressure Methane“, *Journal of Thermophysics and Heat Transfer*, 26 (3), S. 450–463.
- [222] VALDERRAMA, J. O. (2003): „The State of the Cubic Equations of State“, *Industrial & Engineering Chemistry Research*, 42, S. 1603–1618.
- [223] VAN ALBADA, G. D.; VAN LEER, B.; ROBERTS JR., W. W. (1982): „A Comparative Study of Computational Methods in Cosmic Gas Dynamics“, *Astronomy and Astrophysics*, 108 (1), S. 76–84.
- [224] VAN DER WAALS, J. D. (1873): „Over de Continuïteit van den Gas- en Vloeistoestand“, Dissertation, Universit t Leiden.
- [225] VAN LEER, B. (1974): „Towards the Ultimate Conservative Difference Scheme. II. Monotonicity and Conservation Combined in a Second-Order Scheme“, *Journal of Computational Physics*, 14 (4), S. 361–370.
- [226] VAN LEER, B. (1979): „Towards the Ultimate Conservative Difference Scheme. V. A Second-Order Sequel to Godunov’s Method“, *Journal of Computational Physics*, 32 (1), S. 101–136.
- [227] VAN LEEUWEN, M. E. (1994): „Deviation from Corresponding-States Behaviour for Polar Fluids“, *Molecular Physics*, 82 (2), S. 383–392.
- [228] VENKATESWARAN, S.; MERKLE, C. L. (1995): „Dual Time Stepping and Preconditioning for Unsteady Computations“, *AIAA Paper 1995-0078*.
- [229] VEREIN DEUTSCHER INGENIEURE - VDI-GESELLSCHAFT VERFAHRENSTECHNIK UND CHEMIEINGENIEURSWESEN (GVC) (2005): „VDI-W rmeatlas“, 10. Ausgabe.
- [230] VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W. (2007): „An Introduction to Computational Fluid Dynamics - The Finite Volume Method“, 2. Ausgabe, Pearson Education Limited.
- [231] VIGNERON, D.; DEL  GE, G.; ESSERS, J.-A. (2006): „Low Mach Number Local Preconditioning for Unsteady Viscous Finite Volumes Simulations on 3D Unstructured Grids“, *European Conference on Computational Fluid Dynamics*.
- [232] VIGNERON, D.; VAASSEN, J.-M.; ESSERS, J.-A. (2008): „An Implicit Finite Volume Method for the Solution of 3D Low Mach Number Viscous Flows Using A Local Preconditioning Technique“, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 215 (2), S. 610–617.
- [233] WALKER, R. E.; WESTENBERG, A. A. (1960): „Molecular Diffusion Studies in Gases at High Temperature. IV. Results and Interpretation of the CO₂-O₂, CH₄-O₂, H₂-O₂, CO-O₂, and H₂O-O₂ Systems“, *The Journal of Chemical Physics*, 32 (2), S. 436–442.

- [234] WANG, J. W.; LI, H.; YU, S.; CHEN, T. (2011): „Comparison of the Heat Transfer Characteristics of Supercritical Pressure Water to That of Subcritical Pressure Water in Vertically-Upward Tubes“, *International Journal of Multiphase Flow*, 37 (7), S. 769–776.
- [235] WANG, J. W.; LI, H.; YU, S.; CHEN, T. (2011): „Investigation on the Characteristics and Mechanisms of Unusual Heat Transfer of Supercritical Pressure Water in Vertically-Upward Tubes“, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 54 (9–10), S. 1950–1958.
- [236] WANG, X. (2006): „Large Eddy Simulation of Turbulent Pipe/Annular Supercritical CO₂ Flow with Heat Transfer and Perfect Gas Flow in a Ribbed Annuli Passage“, Dissertation, Iowa State University.
- [237] WANG, X.; XU, X.; PLETCHER, R. H. (2005): „Large Eddy Simulation of Supercritical CO₂ Pipe Flow with Constant Wall Heat Flux“, *AIAA Paper 2005-4995*.
- [238] WEI, Y. S.; SADUS, R. J. (2000): „Equations of State for the Calculation of Fluid-Phase Equilibria“, *American Institute of Chemical Engineers*, 46 (1), S. 169–196.
- [239] WEISS, J. M.; SMITH, W. A. (1995): „Preconditioning Applied to Variable and Constant Density Flows“, *AIAA Journal*, 33 (11), S. 2050–2057.
- [240] WEN, Q. L.; GU, H. Y. (2010): „Numerical Simulation of Heat Transfer Deterioration Phenomena in Supercritical Water Through Vertical Tube“, *Annals of Nuclear Energy*, 37 (10), S. 1272–1280.
- [241] WHITSON, C. H.; BRULÉ, M. R. (2000): „Phase Behavior“, Society of Petroleum Engineers Inc.
- [242] WILCOX, D. C. (2008): „Formulation of the k - ω Turbulence Model Revisited“, *AIAA Journal*, 46 (11), S. 2823–2838.
- [243] WILKE, C. R. (1950): „The Viscosity of Gas Mixtures“, *The Journal of Chemical Physics*, 18 (4), S. 517–519.
- [244] WOOLLEY, H. W.; SCOTT, R. B.; BRICKWEDDE, F. G. (1948): „Compilation of Thermal Properties of Hydrogen in Its Various Isotopic and Ortho-Para Modifications“, *Journal of Research of the National Bureau of Standards*, 41, S. 379–475.
- [245] XIAO, X.; EDWARDS, J. R.; HASSAN, H. A.; GAFFNEY JR., R. L. (2005): „Role of Turbulent Prandtl Number on Heat Flux at Hypersonic Mach Numbers“, *AIAA Paper 2005-1098*.
- [246] XU, B.; NAGASHIMA, K.; DESIMONE, J. M.; JOHNSON JR., C. S. (2003): „Diffusion of Water in Liquid and Supercritical Carbon Dioxide: An NMR Study“, *The Journal of Physical Chemistry A*, 107 (1), S. 1–3.

- [247] YAMAGATA, K.; NISHIKAWA, K.; HASEGAWA, S.; FUJII, T.; YOSHIDA, S. (1972): „Forced Convective Heat Transfer to Supercritical Water Flowing in Tubes“, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 15 (12), S. 2575–2593.
- [248] YANG, V.: (2004): „Liquid-Propellant Rocket Engine Injector Dynamics and Combustion Processes at Supercritical Conditions“, Technischer Report, Department of Mechanical Engineering, The Pennsylvania State University.
- [249] ZHANG, Z.; DUAN, Z. (2002): „Phase Equilibria of the System Methane-Ethane from Temperature Scaling Gibbs Ensemble Monte Carlo Simulation“, *Geochimica et Cosmochimica Acta*, 66 (19), S. 3431–3439.
- [250] ZONG, N.; YANG, V. (2006): „Cryogenic Fluid Jets and Mixing Layers in Transcritical and Supercritical Environments“, *Combustion Science and Technology*, 178, S. 193–227.

A Helmholtz-Residuumsfunktion der SRKmVK Zustandsgleichung

Die in Kapitel 2 betrachteten Formeln basieren auf der Helmholtz-Residuumsfunktion sowie deren partiellen Ableitungen und wurden in allgemeingültiger Form dargestellt. Für die dreiparametrische Soave-Redlich-Kwong Zustandsgleichung mit Volumenkorrektur (SRKmVK⁶⁵)

$$p = \frac{R_u T}{\dot{v}_m - b} - \frac{a}{\dot{v}_m (\dot{v}_m + b)} = \frac{n R_u T}{\dot{V} - \mathcal{B}} - \frac{\mathcal{A}}{\dot{V}(\dot{V} + \mathcal{B})} \quad (\text{A.1})$$

mit $v_m = \dot{v}_m - c$, $\dot{V} = n \dot{v}_m = V + \mathcal{C}$, $\mathcal{A} = n^2 a$, $\mathcal{B} = n b$ und $\mathcal{C} = n c$

lautet die Helmholtz-Residuumsfunktion nach Auswertung von Glg. (2.4.32) mit Glg. (2.4.21):

$$\begin{aligned} \Psi(T, V, \{n_\alpha\}) &:= \frac{A^r(T, V, \{n_\alpha\})}{R_u T} = -\frac{1}{R_u T} \int_{\infty}^V \left[p(T, V', \{n_\alpha\}) - \frac{n R_u T}{V'} \right] dV' = \\ &= - \int_{\infty}^{\dot{V}=V+\mathcal{C}} \left[\frac{p(T, \dot{V}', \{n_\alpha\})}{R_u T} - \frac{n}{\dot{V}' - \mathcal{C}} \right] d\dot{V}' = \\ &= n \ln \left(\frac{\dot{V} - \mathcal{C}}{\dot{V} - \mathcal{B}} \right) + \frac{\mathcal{A}}{R_u T} \frac{1}{\mathcal{B}} \ln \left(\frac{\dot{V}}{\dot{V} + \mathcal{B}} \right) = \\ &= n \underbrace{\ln \left(\frac{V}{V + \mathcal{C} - \mathcal{B}} \right)}_{=:L^1} + \frac{\mathcal{A}}{R_u T} \frac{1}{\mathcal{B}} \underbrace{\ln \left(\frac{V + \mathcal{C}}{V + \mathcal{C} + \mathcal{B}} \right)}_{=:L^2} . \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Für physikalisch sinnvolle Volumen ($\dot{V} > \mathcal{B}$) können, wie hier geschehen, die Betragsstriche um die Argumente der Logarithmen weggelassen werden. Die partiellen ersten und zweiten Ableitungen der Helmholtz-Residuumsfunktion in Abhängigkeit der natürlichen Variablen sowie der drei Zustandsgleichungsparameter \mathcal{A} , \mathcal{B} und \mathcal{C} ergeben sich dann zu

$$\begin{aligned} \Psi_{\Theta_k} &= \Psi_{\Theta_k}^1 + \Psi_{\Theta_k}^2, \\ \Psi_{\Theta_k \Theta_l} &= \Psi_{\Theta_k \Theta_l}^1 + \Psi_{\Theta_k \Theta_l}^2 \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

⁶⁵ Die SRK Zustandsgleichung ohne Volumenkorrektur ergibt sich einfach durch $c = 0$.

mit $\{\Theta_k\} = \{n, T, V, \mathcal{A}(T, \{n_\alpha\}), \mathcal{B}(\{n_\alpha\}), \mathcal{C}(\{n_\alpha\})\}$ und

$$\Psi_n^1 = L^1, \quad \Psi_V^1 = n L_V^1, \quad \Psi_B^1 = n L_B^1, \quad (\text{A.4})$$

$$\Psi_C^1 = -\Psi_B^1, \quad \Psi_T^2 = -\frac{1}{T}\Psi^2, \quad \Psi_V^2 = \frac{\mathcal{A}}{R_u T} L_V^2,$$

$$\Psi_A^2 = \frac{1}{\mathcal{A}}\Psi^2, \quad \Psi_B^2 = \frac{\mathcal{A}}{R_u T} L_B^2, \quad \Psi_C^2 = \Psi_V^2,$$

$$L_V^1 = L_B^1 \frac{\mathcal{C} - \mathcal{B}}{V}, \quad L_B^1 = \frac{1}{\dot{V} - \mathcal{B}}, \quad L_V^2 = \frac{1}{\dot{V}(\dot{V} + \mathcal{B})}, \quad (\text{A.5})$$

$$L_B^2 = \frac{1}{\mathcal{B}}(L^2 + \dot{V} L_V^2), \quad (\text{A.6})$$

$$\Psi_{VV}^1 = \Psi_{BB}^1 - \frac{n}{V^2}, \quad \Psi_{BB}^1 = n (L_B^1)^2, \quad \Psi_{CC}^1 = \Psi_{BB}^1, \quad (\text{A.7})$$

$$\Psi_{nV}^1 = L_V^1, \quad \Psi_{nB}^1 = L_B^1, \quad \Psi_{nC}^1 = -\Psi_{nB}^1,$$

$$\Psi_{VB}^1 = -\Psi_{BB}^1, \quad \Psi_{VC}^1 = \Psi_{BB}^1, \quad \Psi_{BC}^1 = -\Psi_{BB}^1,$$

$$\Psi_{TT}^2 = -\frac{2}{T}\Psi_T^2, \quad \Psi_{VV}^2 = \frac{\mathcal{A}}{R_u T} L_{VV}^2, \quad \Psi_{BB}^2 = \frac{\mathcal{A}}{R_u T} L_{BB}^2,$$

$$\Psi_{CC}^2 = \Psi_{VV}^2, \quad \Psi_{TV}^2 = -\frac{1}{T}\Psi_V^2, \quad \Psi_{TA}^2 = \frac{1}{\mathcal{A}}\Psi_T^2,$$

$$\Psi_{TB}^2 = -\frac{1}{T}\Psi_B^2, \quad \Psi_{TC}^2 = -\frac{1}{T}\Psi_C^2, \quad \Psi_{VA}^2 = \frac{1}{\mathcal{A}}\Psi_V^2,$$

$$\Psi_{VB}^2 = \frac{\mathcal{A}}{R_u T} L_{VB}^2, \quad \Psi_{VC}^2 = \Psi_{VV}^2, \quad \Psi_{AB}^2 = \frac{1}{\mathcal{A}}\Psi_B^2,$$

$$\Psi_{AC}^2 = \Psi_{VA}^2, \quad \Psi_{BC}^2 = \Psi_{VB}^2,$$

$$L_{VV}^2 = -(2\dot{V} + \mathcal{B})(L_V^2)^2, \quad (\text{A.8})$$

$$L_{BB}^2 = -\frac{1}{\mathcal{B}}(2L_B^2 + \dot{V} L_{VB}^2),$$

$$L_{VB}^2 = -\frac{1}{\mathcal{B}}(2L_V^2 + \dot{V} L_{VV}^2) = -L_V^2 \frac{1}{\dot{V} + \mathcal{B}}.$$

Falls Ψ_x^1 oder Ψ_x^2 bzw. Ψ_{xy}^1 oder Ψ_{xy}^2 nicht angegeben sind, dann sind deren Einträge gleich Null oder werden nicht benötigt.

Für die partiellen Ableitungen der Helmholtz-Residuumsfunktion $\Psi(T, V, \{n_\alpha\})$ (in Abhängigkeit ihrer natürlichen Variablen) aus den Gleichungen (2.4.54) und (2.4.55) müssen noch die Ableitungen der Zustandsgleichungsparameter \mathcal{A} , \mathcal{B} und \mathcal{C} berechnet werden. Für diese lassen sich allgemeine Formeln herleiten, welche von den verwendeten Kombinations- und Mischungsregeln sowie ihrem „Molvorfaktor“ (Potenz von n) abhängen. Der Parameter $\mathcal{A} = n^2 a$ hat z. B. den Vorfaktor 2, $B = n b$ und $C = n c$ haben den Vorfaktor 1. Hier werden zum leichteren Verständnis nur die in der Arbeit verwendeten Ausdrücke mit dem geometrischen Mittel (siehe Glg. (2.3.9)) für A und dem arithmetischen Mittel (siehe Glg. (2.3.8)) für B und C aufgelistet. Außerdem wird entsprechend der SRK bzw. SRKmVK Zustandsgleichung keine Volumenabhängigkeit in den Parametern \mathcal{A} , \mathcal{B} und \mathcal{C} berücksichtigt sowie eine Temperaturabhängigkeit lediglich für \mathcal{A} . Mit der Definition von $a = a(T)$ aus Glg. (2.3.4) ergeben sich folgende Ausdrücke für die partiellen Ableitungen der Zustandsgleichungsparameter nach den Molanteilen der Spezies und der Temperatur (nur für \mathcal{A}):

$$a = \underbrace{\left(\sum_{\alpha=1}^{N_{\text{sp}}} X_\alpha a_\alpha^{1/2} \right)}_{=: q_a}^2, \quad (\text{A.9})$$

$$\mathcal{A} = n^2 a = n^2 q_a^2 = n^2 \left(\sum_{\alpha=1}^{N_{\text{sp}}} X_\alpha a_\alpha^{1/2} \right)^2 = \left(\sum_{\alpha=1}^{N_{\text{sp}}} n_\alpha a_\alpha^{1/2} \right)^2, \quad (\text{A.10})$$

$$\mathcal{A}_T = \left(\frac{\partial \mathcal{A}}{\partial T} \right)_{\{n_\alpha\}} = n^2 2 q_a \left(\frac{\partial q_a}{\partial T} \right)_{\{n_\alpha\}}, \quad (\text{A.11})$$

$$\mathcal{A}_{TT} = \left(\frac{\partial^2 \mathcal{A}}{\partial T^2} \right)_{\{n_\alpha\}} = n^2 2 \left[\left(\frac{\partial q_a}{\partial T} \right)_{\{n_\alpha\}}^2 + q_a \left(\frac{\partial^2 q_a}{\partial T^2} \right)_{\{n_\alpha\}} \right], \quad (\text{A.12})$$

$$\mathcal{A}_{n_\alpha} = \left(\frac{\partial \mathcal{A}}{\partial n_\alpha} \right)_{T, \{n_{\beta \neq \alpha}\}} = n 2 q_a a_\alpha^{1/2}, \quad (\text{A.13})$$

$$\mathcal{A}_{T n_\alpha} = \left(\frac{\partial^2 \mathcal{A}}{\partial T \partial n_\alpha} \right)_{\{n_{\beta \neq \alpha}\}} = n \left[2 a_\alpha^{1/2} \left(\frac{\partial q_a}{\partial T} \right)_{\{n_\alpha\}} + q_a \frac{1}{a_\alpha^{1/2}} \left(\frac{\partial a_\alpha}{\partial T} \right) \right], \quad (\text{A.14})$$

$$\left(\frac{\partial q_a}{\partial T} \right)_{\{n_\alpha\}} = \sum_{\alpha=1}^{N_{\text{sp}}} X_\alpha \frac{1}{2 a_\alpha^{1/2}} \left(\frac{\partial a_\alpha}{\partial T} \right), \quad (\text{A.15})$$

$$\left(\frac{\partial^2 q_a}{\partial T^2} \right)_{\{n_\alpha\}} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha=1}^{N_{\text{sp}}} X_\alpha \frac{1}{a_\alpha^{1/2}} \left[\left(\frac{\partial^2 a_\alpha}{\partial T^2} \right) - \frac{1}{2 a_\alpha} \left(\frac{\partial a_\alpha}{\partial T} \right)^2 \right], \quad (\text{A.16})$$

$$a_\alpha = a_{\text{cr},\alpha} \alpha_\alpha(T), \quad (\text{A.17})$$

$$\alpha_\alpha(T) = \left[\underbrace{1 + \kappa_\alpha \left(1 - \sqrt{T_{\text{r},\alpha}} \right)}_{=: f_{a,\alpha}} \right]^2 + \varepsilon_\alpha \quad \text{mit} \quad T_{\text{r},\alpha} = T / T_{\text{cr},\alpha}, \quad (\text{A.18})$$

$$\left(\frac{\partial a_\alpha}{\partial T} \right) = a_{\text{cr},\alpha} \left(\frac{\partial \alpha_\alpha}{\partial T} \right) = -a_{\text{cr},\alpha} \frac{\sqrt{T_{\text{r},\alpha}}}{T} \kappa_\alpha f_{a,\alpha}, \quad (\text{A.19})$$

$$\left(\frac{\partial^2 a_\alpha}{\partial T^2} \right) = a_{\text{cr},\alpha} \left(\frac{\partial^2 \alpha_\alpha}{\partial T^2} \right) = a_{\text{cr},\alpha} \frac{\sqrt{T_{\text{r},\alpha}}}{2 T^2} \kappa_\alpha \left(f_{a,\alpha} + \kappa_\alpha \sqrt{T_{\text{r},\alpha}} \right), \quad (\text{A.20})$$

$$b = \sum_{\alpha=1}^{N_{\text{sp}}} X_\alpha b_\alpha, \quad (\text{A.21})$$

$$\mathcal{B} = nb = n \sum_{\alpha=1}^{N_{\text{sp}}} X_\alpha b_\alpha = \sum_{\alpha=1}^{N_{\text{sp}}} n_\alpha b_\alpha, \quad (\text{A.22})$$

$$\mathcal{B}_{n_\alpha} = \left(\frac{\partial \mathcal{B}}{\partial n_\alpha} \right)_{T, \{n_{\beta \neq \alpha}\}} = b_\alpha. \quad (\text{A.23})$$

Für den Parameter \mathcal{C} ergeben sich zum Parameter \mathcal{B} analoge Ausdrücke.

Der Ausdruck für die Differenz der reduzierten molaren Gibbs-Energie aus Glg. (2.3.13) bei gleichem Druck, gleicher Temperatur und gleicher Zusammensetzung lautet für die SRKmVK Zustandsgleichung

$$\Delta_g := \frac{g_{\text{m},2}(T, p, \{Y_\alpha\}) - g_{\text{m},1}(T, p, \{Y_\alpha\})}{R_{\text{u}} T} \quad (\text{A.24})$$

$$\begin{aligned} &= \left(\psi_2(T, v_{\text{m},1}, \{Y_\alpha\}) - \psi_1(T, v_{\text{m},2}, \{Y_\alpha\}) \right) + (Z_2 - Z_1) - \ln \left(\frac{Z_2}{Z_1} \right) = \\ &= \ln \left(\frac{V_1 + \mathcal{C} - \mathcal{B}}{V_2 + \mathcal{C} - \mathcal{B}} \right) + \frac{\mathcal{A}}{n R_{\text{u}} T \mathcal{B}} \ln \left(\frac{(V_2 + \mathcal{C})(V_1 + \mathcal{C} + \mathcal{B})}{(V_1 + \mathcal{C})(V_2 + \mathcal{C} + \mathcal{B})} \right) + Z_2 - Z_1. \end{aligned}$$

B Lösung kubischer Gleichungen

Zur Bestimmung des molaren Volumens aus dem Druck, der Temperatur und der Stoffzusammensetzung, aber auch zur Berechnung der Zustandsgleichungsparameter jedes Reinstoffes werden beim Einsatz kubischer Zustandsgleichungen die Nullstellen einer kubischen Gleichung der Form

$$b_3 x^3 + b_2 x^2 + b_1 x + b_0 = 0 \quad (\text{B.1})$$

gesucht. Die Koeffizienten zur Bestimmung des verschobenen molaren Volumens $x \equiv \hat{v}_m$ für die SRKmVK Zustandsgleichung (Glg. (2.3.6)) ergeben sich durch Multiplikation mit dem Hauptnenner beispielsweise zu

$$b_3 \equiv p, \quad (\text{B.2})$$

$$b_2 \equiv -R_u T,$$

$$b_1 \equiv -p b^2 - R_u T b + a,$$

$$b_0 \equiv -a b.$$

Die Lösung der kubischen Gleichung (B.1) erfolgt in dieser Arbeit effizient mit der Methode von Cardano (Herbison (1994) [76]). Ausführliche Erläuterungen dazu finden sich zahlreich in der Literatur (z. B. Ruiz (2012) [187]). Hier wird lediglich die Lösung der kubischen Gleichung in kompakter Form angegeben.

In der Methode von Cardano werden in Glg. (B.1) zuerst alle Koeffizienten mit dem Koeffizienten b_3 normiert:

$$x^3 + a_2 x^2 + a_1 x + a_0 = 0 \quad \text{mit} \quad a_i = b_i / b_3. \quad (\text{B.3})$$

Im weiteren Verlauf erhält man folgende Ausdrücke:

$$r = \frac{1}{3} \left(a_1 - \frac{a_2^2}{3} \right), \quad (\text{B.4})$$

$$s = 2 \left(\frac{a_2}{3} \right)^3 - \frac{a_1 a_2}{3} + a_0, \quad (\text{B.5})$$

$$\Delta = s^2 + 4 r^3. \quad (\text{B.6})$$

Die Anzahl der Lösungen (Nullstellen von Glg. (B.1)) hängt vom Vorzeichen der Diskrimi-

nante Δ ab:

- $\Delta > 0 \Rightarrow 1$ Lösung:

$$q = \left(\frac{1}{2} \left(\sqrt{\Delta} + \text{sign}(s) \cdot s \right) \right)^{1/3}, \quad (\text{B.7})$$

$$x_1 = \text{sign}(s) \cdot \left(\frac{r}{q} - q \right) - \frac{a_2}{3}, \quad (\text{B.8})$$

- $\Delta = 0$

- $s = 0 \Rightarrow 1$ Lösung:

$$x_1 = -\frac{a_2}{3}, \quad (\text{B.9})$$

- $s \neq 0 \Rightarrow 2$ Lösungen:

$$q = \left(\frac{s}{2} \right)^{1/3}, \quad (\text{B.10})$$

$$x_1 = -2q - \frac{a_2}{3}, \quad (\text{B.11})$$

$$x_2 = q - \frac{a_2}{3}, \quad (\text{B.12})$$

- $\Delta < 0 \Rightarrow 3$ Lösungen:

$$\phi = \arccos \left(-\frac{s}{2\sqrt{-r^3}} \right) / 3, \quad (\text{B.13})$$

$$q = 2\sqrt{-r}, \quad (\text{B.14})$$

$$x_1 = q \cdot \cos(\phi) - \frac{a_2}{3}, \quad (\text{B.15})$$

$$x_2 = q \cdot \cos \left(\phi - \frac{2}{3}\pi \right) - \frac{a_2}{3}, \quad (\text{B.16})$$

$$x_3 = q \cdot \cos \left(\phi - \frac{4}{3}\pi \right) - \frac{a_2}{3}. \quad (\text{B.17})$$

Die angegebene Formulierung erlaubt eine effiziente Implementierung und verringert Aus-

lösungsfehler aufgrund der begrenzten Anzahl an Nachkommastellen in der Gleitkommaarithmetik des Rechners (Herbison (1994) [76]).

C Berechnung der Zustandsgleichungsparameter

Für jeden Reinstoff müssen in dieser Arbeit einmal vor Beginn der Simulation dessen kritische Zustandsgleichungsparameter bei $T = T_{\text{cr}}$ bestimmt werden. Dazu wird an dieser Stelle eine allgemeine kubische Zustandsgleichung mit den drei stoffabhängigen Parametern $a = a(T) = a_{\text{cr}} \alpha(T_{\text{r}})$, $b = b_{\text{cr}}$ und $c = c_{\text{cr}}$ (Volumenkorrektur) und den beiden Konstanten u und w betrachtet:

$$p = \frac{R_{\text{u}}T}{\dot{v}_{\text{m}} - b} - \frac{a}{\dot{v}_{\text{m}}^2 + u b \dot{v}_{\text{m}} + w b^2} \quad \text{mit} \quad v_{\text{m}} = \dot{v}_{\text{m}} - c. \quad (\text{C.1})$$

Beispielsweise gilt für die SRK sowie die SRKmVK Zustandsgleichung $u = 1, w = 0$ und für die PR Zustandsgleichung $u = 2, w = -1$. Gleichung (C.1) lässt sich in einer reduzierten, dimensionslosen Form schreiben als

$$p_{\text{r}} = \frac{T_{\text{r}}}{\dot{\gamma} - \Omega_b} - \frac{\Omega_a}{\dot{\gamma}^2 + u \Omega_b \dot{\gamma} + w \Omega_b^2}, \quad (\text{C.2})$$

$$\text{mit } p_{\text{r}} = \frac{p}{p_{\text{cr}}}, \quad T_{\text{r}} = \frac{T}{T_{\text{cr}}}, \quad \dot{\gamma} = \frac{v_{\text{m}} p_{\text{cr}}}{R_{\text{u}} T_{\text{cr}}} = \frac{(\dot{v}_{\text{m}} - c) p_{\text{cr}}}{R_{\text{u}} T_{\text{cr}}} = \dot{\gamma} - \Omega_c$$

$$\text{und } \Omega_a = a_{\text{cr}} \alpha(T_{\text{r}}) \frac{p_{\text{cr}}}{(R_{\text{u}} T_{\text{cr}})^2}, \quad \Omega_b = b \frac{p_{\text{cr}}}{R_{\text{u}} T_{\text{cr}}}, \quad \Omega_c = c \frac{p_{\text{cr}}}{R_{\text{u}} T_{\text{cr}}}.$$

Am kritischen Punkt gilt $T_{\text{r}} = 1$, $p_{\text{r}} = 1$ und $\alpha(T_{\text{r}} = 1) = 1$. Es ist gebräuchlich (O'Connell und Haile (2005) [159]), die Zustandsgleichungsparameter a_{cr} und b aus den Bedingungen

$$\left(\frac{\partial p}{\partial V} \right)_{T=T_{\text{cr}}} = 0 \quad \text{und} \quad \left(\frac{\partial^2 p}{\partial V^2} \right)_{T=T_{\text{cr}}} = 0 \quad (\text{C.3})$$

abzuleiten, welche am kritischen Punkt gelten. Bei zwei Bedingungen können zwei der drei kritischen Variablen T_{cr} , p_{cr} und $v_{\text{m,cr}}$ aufgeprägt werden. In der Regel werden $T_{\text{cr}} = T_{\text{cr}}^{\text{Exp}}$ und $p_{\text{cr}} = p_{\text{cr}}^{\text{Exp}}$ gesetzt. Der Index Exp kennzeichnet die vorgegebenen (experimentellen) Werte. Das kritische molare Volumen $v_{\text{m,cr}} = \dot{v}_{\text{m,cr}} - c$, welches dann von der Zustandsgleichung vorhergesagt wird, entspricht im Allgemeinen nicht dem Wert $v_{\text{m,cr}}^{\text{Exp}}$ der Realität, der in Experimenten gemessen werden kann (siehe Diskussion am Ende dieses Abschnitts).

Entsprechendes gilt für den kritischen Kompressibilitätsfaktor:

$$\gamma_{\text{cr}} = \gamma|_{T_{\text{r}}, p_{\text{r}}=1} = \frac{v_{\text{m,cr}} p_{\text{cr}}}{R_{\text{u}} T_{\text{cr}}} = Z_{\text{cr}} \neq Z_{\text{cr}}^{\text{Exp}}. \quad (\text{C.4})$$

Ein alternativer und praktischerer Ansatz ist, dass die Bedingungen in Glg. (C.3) gleichbedeutend sind mit einem Sattelpunkt am kritischen Punkt. Multipliziert man Glg. (C.2) mit dem Hauptnenner durch, so lautet die resultierende Bedingung am kritischen Punkt wie folgt:

$$\begin{aligned} \dot{\gamma}^3 + \dot{\gamma}^2 [\Omega_b(u-1) - 1] + \dot{\gamma} [\Omega_b^2(w-u) - u\Omega_b + \Omega_a] + [-w\Omega_b^3 - w\Omega_b^2 - \Omega_a\Omega_b] &\stackrel{!}{=} \quad (\text{C.5}) \\ &\stackrel{!}{=} \xi (\dot{\gamma} - \dot{\gamma}_{\text{cr}})^3 = \xi (\dot{\gamma}^3 - 3\dot{\gamma}^2\dot{\gamma}_{\text{cr}} + 3\dot{\gamma}\dot{\gamma}_{\text{cr}}^2 - \dot{\gamma}_{\text{cr}}^3). \end{aligned}$$

Durch Koeffizientenvergleich in den Potenzen von $\dot{\gamma}$ ergibt sich $\xi = 1$. Außerdem kann aus den anderen drei Bedingungen folgende Gleichung hergeleitet werden:

$$\Omega_b^3 [(u+2)^3] + \Omega_b^2 [3(9w - u^2 + 5u + 5)] + \Omega_b [3(u+2)] - 1 = 0. \quad (\text{C.6})$$

Dies ist eine kubische Gleichung in Ω_b , welche z. B. mit Hilfe der Methode von Cardano (siehe Anhang B) gelöst werden kann. Die korrekte Lösung ist dabei die kleinste, positive, reelle Lösung dieser Gleichung. Der kritische Kompressibilitätsfaktor der Zustandsgleichung kann damit folgendermaßen berechnet werden:

$$Z_{\text{cr}} = \gamma_{\text{cr}} = \dot{Z}_{\text{cr}} - \Omega_c, \quad (\text{C.7})$$

$$\text{mit } \dot{Z}_{\text{cr}} = \dot{\gamma}_{\text{cr}} = \frac{1}{3}(1 + \Omega_b(1-u)). \quad (\text{C.8})$$

Der zweite Parameter Ω_a bestimmt sich dann zu

$$\Omega_a = 3\dot{\gamma}_{\text{cr}}^2 + \Omega_b^2(u-w) + u\Omega_b. \quad (\text{C.9})$$

Die unnormierten Parameter a_{cr} und b sowie das kritische molare Volumen der Zustandsgleichung $v_{\text{m,cr}}$ lassen sich über die Beziehungen in Glg. (C.2) berechnen:

$$a_{\text{cr}} = \Omega_a \frac{(R_{\text{u}} T_{\text{cr}})^2}{p_{\text{cr}}}, \quad (\text{C.10})$$

$$b = \Omega_b \frac{R_{\text{u}} T_{\text{cr}}}{p_{\text{cr}}}, \quad (\text{C.11})$$

$$v_{\text{m,cr}} = (\dot{\gamma}_{\text{cr}} - \Omega_c) \frac{R_{\text{u}} T_{\text{cr}}}{p_{\text{cr}}}. \quad (\text{C.12})$$

Als letzter freier Parameter verbleibt Ω_c . Ohne Volumenkorrektur ist dieser gleich Null. Es ist leicht ersichtlich, dass Zustandsgleichungen mit speziesunabhängigen Parametern u und

w und ohne Volumenkorrektur für alle Spezies stets den gleichen, von u und w abhängigen, kritischen Kompressibilitätsfaktor voraussagen. Für die SRK Zustandsgleichung ergibt sich z. B. $Z_{\text{cr}}^{\text{SRK}} = 0,3333$, für die PR Zustandsgleichung $Z_{\text{cr}}^{\text{PR}} = 0,3074$. Diese Werte sind jedoch nur für wenige Spezies eine gute Näherung (siehe Tab. D.1). Vor allem große und polare Fluide haben wesentlich kleinere Werte. Mit Volumenkorrektur kann Ω_c so gewählt werden, dass $Z_{\text{cr}} = Z_{\text{cr}}^{\text{Exp}}$ und somit am kritischen Punkt eine perfekte Übereinstimmung mit den experimentellen Werten vorliegt. Allerdings bringt dies im Allgemeinen eine Verschlechterung in anderen thermodynamischen Bereichen mit sich. In der Literatur finden sich zahlreiche Vorschläge für Volumenkorrekturen. Die bekannteste ist jene von Peneloux et al. (1982) [166]. Diese Formeln sind jedoch zumeist für eine begrenzte Anzahl an Spezies, vorwiegend für Kohlenwasserstoffe abgeleitet und sollten nicht blind auf andere Stoffe übertragen werden. In dieser Arbeit wurde die Volumenkorrektur, wenn überhaupt, testfallspezifisch eingesetzt und so an die gegebenen Bedingungen angepasst, dass sich im relevanten Temperatur- und Druckbereich eine gute Übereinstimmung mit experimentellen Dichtewerten ergibt.

D Speziesparameter und -stoffdaten

Radikale wie H, O, OH, HO₂ und H₂O₂ treten als Zwischenprodukte der Verbrennung auf. Isoliert sind sie im Allgemeinen nicht stabil, so dass auch keine experimentellen Werte für viele Stoffparameter wie kritische Temperatur, Druck und Dichte vorhanden sind. Sind jedoch die Parameter des Lennard-Jones-Potentials z. B. aus Molekularrechnungen bekannt, können aus diesen die kritischen Parameter abgeschätzt werden. In der Literatur finden sich verschiedenste Formeln mit mäßiger Allgemeingültigkeit und Genauigkeit (für stabile Spezies mit bekannten kritischen Parametern). Die geschätzten kritischen Parameter hängen sowohl sehr stark von der Abschätzungsformel, als auch den Lennard-Jones-Potentialparametern ab. In dieser Arbeit wurden nachfolgende Abschätzungsformeln von Leland und Chappellear (1968) [113] für Komponenten mit unbekannten, kritischen Parametern verwendet. Die Zahlenwerte sind in der hier angegebenen Form in SI-Einheiten einzusetzen.

$$T_{\text{cr}} = \frac{\epsilon/k_{\text{B}}}{0,8}, \quad (\text{D.1})$$

$$v_{\text{m,cr}} = \frac{M_{\text{w}}}{\rho_{\text{cr}}} = 3,14 N_{\text{A}} \sigma^3, \quad (\text{D.2})$$

$$Z_{\text{cr}} = 0,292, \quad (\text{D.3})$$

$$p_{\text{cr}} = \frac{Z_{\text{cr}} R_{\text{u}} T_{\text{cr}}}{v_{\text{m,cr}}}. \quad (\text{D.4})$$

Dabei ist $N_{\text{A}} = 6,0221412927 \cdot 10^{23}$ die Avogadro-Konstante. Der azentrische Faktor wurde für alle Radikale zu $\varpi = 0$ gesetzt. Die in dieser Arbeit verwendeten Stoffparameter sind in Tab. D.1 gegeben.

Neben den Speziesparametern werden für jeden Reinstoff die Koeffizienten der NASA-Polynome benötigt. Die in dieser Arbeit verwendeten Polynomkoeffizienten mit den zugehörigen Temperaturbereichen sind in Tab. D.2 gegeben. Weiterhin sind in den Tabellen D.3 und D.4 die Polynomkoeffizienten der gefitteten Viskositäten und Wärmeleitfähigkeiten bei Idealgasbedingungen von H₂⁽ⁿ⁾ und H₂^(p), O₂ sowie H₂O gegeben. Außerhalb des gültigen Temperaturbereichs wird jeweils der Wert bei der minimal / maximal zulässigen Temperatur verwendet.

Tabelle D.1: Speziesparameter für die verwendeten Fluide.

Spezies	T_{cr} [K]	p_{cr} [bar]	ρ_{cr} [kg/m ³]	Z_{cr} [-]	ϖ [-]	ϵ/k_{B} [K]	σ [Å]	Σ_V [-]
N ₂	126,192*	33,958*	313,300*	0,289	0,0372*	102,4 [‡]	3,640 [‡]	18,5 [§]
O ₂	154,581*	50,430*	436,1*	0,302	0,0222*	127,9 [‡]	0,338 [‡]	16,3 [§]
H ₂ ⁽ⁿ⁾	33,145*	12,964*	31,263*	0,303	-0,219*	38,0 [†]	2,920 [†]	6,12 [§]
H ₂ ^(p)	32,938*	12,858*	31,323*	0,302	-0,219*	38,0 [†]	2,920 [†]	6,12 [§]
H ₂ O	647,096*	220,640*	322,00*	0,229	0,3443*	572,4 [§]	2,605 [§]	13,1 [§]
OH	100,00#	61,736#	432,471#	0,292#	0,0	80,0 [†]	2,750 [†]	8,42 [§]
O	100,00#	61,736#	406,841#	0,292#	0,0	80,0 [†]	2,750 [†]	6,11 [§]
H	181,25#	270,120#	61,871#	0,292#	0,0	145,0 [†]	2,050 [†]	2,31 [§]
HO ₂	134,25#	41,685#	422,131#	0,292#	0,0	107,4 [†]	3,458 [†]	14,53 [§]
H ₂ O ₂	134,25#	41,685#	435,021#	0,292#	0,0	107,4 [†]	3,458 [†]	16,84 [§]
CO ₂	304,128*	73,773*	467,60*	0,275	0,224*	249,8 [‡]	3,760 [‡]	26,7 [§]
C ₃ H ₈	369,825*	42,477*	220,478*	0,276	0,1524*	266,8 [†]	4,982 [†]	66,18 [§]

Referenzen: * REFPROP (<http://www.nist.gov/srd/nist23.cfm> (28. April 2016)),

† CHEMKIN[®] [24], ‡ Bastien et al. (2010) [8], § Hirschfelder et al. (1954) [80],

★ Poling et al. (2001) [176], \$ Fuller et al. (1969) [54].

Werte für Radikale anhand von Gleichungen (D.1) - (D.4) berechnet.

Tabelle D.2: Gefittete NASA-Polynome in 7-Koeffizienten Form.

Spezies	Temperaturbereich	a_0	a_1	a_2	a_3	a_4	b_1	b_2
N ₂	200 K - 1000 K	3,550275400E+00	-2,585340135E-04	-1,903748182E-07	2,152196400E-09	-1,325899408E-12	-1,048968677E+03	2,886331689E+00
	1000 K - 5000 K	2,813888471E+00	1,660287126E-03	-6,588184850E-07	1,205641922E-10	-8,257744920E-15	-8,714647090E+02	6,636313400E+00
O ₂	200 K - 1000 K	3,797937380E+00	-3,119063396E-03	1,018536948E-05	-1,007055991E-08	3,402772190E-12	-1,065414707E+03	3,594042410E+00
	1000 K - 5000 K	3,598752800E+00	7,854903020E-04	-2,278934204E-07	4,346030790E-11	-3,354245800E-15	-1,194699110E+03	3,752230030E+00
H ₂ ⁽ⁿ⁾	40 K - 140 K	2,611102803E+00	-3,951778180E-03	3,124172359E-06	8,352508990E-07	-3,693913832E-09	-8,924504730E+02	4,416944125E-01
	140 K - 300 K	1,285601466E+00	1,943142054E-02	-6,326657200E-05	8,802949910E-08	-4,052038439E-11	-8,428447420E+02	4,701416124E+00
	300 K - 1000 K	2,831846305E+00	4,328337130E-03	-1,003171415E-05	1,002283767E-08	-3,517565103E-12	-9,662130420E+02	-1,355542426E+00
	1000 K - 5000 K	3,150072423E+00	4,218800340E-04	1,034511776E-07	-4,619710740E-11	4,535324273E-15	-8,967604460E+02	-2,239076322E+00
H ₂ ^(p)	40 K - 120 K	2,459897664E+00	1,240663672E-02	-5,818249080E-04	8,906661660E-06	-3,537627467E-08	-1,019513336E+03	-1,955799003E-01
	120 K - 300 K	-5,245852320E+00	1,609515569E-01	-1,013272393E-03	2,723196408E-06	-2,688045013E-09	-7,579597250E+02	2,384378415E+01
	300 K - 1000 K	4,658983680E+00	-7,021480880E-03	1,564356590E-05	-1,503263985E-08	5,389965705E-12	-1,194963032E+03	-9,370697060E+00
	1000 K - 5000 K	3,163131140E+00	4,111966090E-04	1,057488526E-07	-4,618819530E-11	4,506152038E-15	-9,056978910E+02	-2,350601742E+00
H ₂ O	200 K - 1000 K	4,216536990E+00	-2,177066297E-03	6,907826460E-06	-5,935719870E-09	1,956808596E-12	-3,029543718E+04	-9,226985840E-01
	1000 K - 5000 K	2,720530363E+00	2,887858677E-03	-7,156060870E-07	7,834692380E-11	-2,743998221E-15	-2,990235504E+04	6,643339610E+00
OH	200 K - 1000 K	3,960183340E+00	-2,171433417E-03	4,055619400E-06	-3,323096730E-09	1,172808788E-12	3,369479200E+03	2,934241338E-02
	1000 K - 5000 K	2,899717033E+00	9,955122210E-04	-2,251233829E-07	2,491508653E-11	-9,395767750E-16	3,671133670E+03	5,505643050E+00
O	200 K - 1000 K	3,148783786E+00	-3,140518211E-03	6,310782000E-06	-5,808779540E-09	2,008357938E-12	2,912424567E+04	2,133712117E+00
	1000 K - 5000 K	2,560047702E+00	-5,131138290E-05	7,678550210E-09	2,510110286E-12	-2,990068063E-16	2,921832180E+04	4,827969490E+00
H	200 K - 1000 K	2,500000000E+00	0,000000000E+00	0,000000000E+00	0,000000000E+00	0,000000000E+00	2,547370802E+04	-4,466828380E-01
	1000 K - 5000 K	2,500000000E+00	0,000000000E+00	0,000000000E+00	0,000000000E+00	0,000000000E+00	2,547370802E+04	-4,466828380E-01
HO ₂	200 K - 1000 K	4,222651760E+00	-4,19743360E-03	1,988468889E-05	-2,312308239E-08	8,951645450E-12	2,691019782E+02	4,050211290E+00
	1000 K - 5000 K	4,305441960E+00	1,666391824E-03	-2,285355833E-07	-7,120728750E-12	2,292874558E-15	-3,031255979E+01	2,203121467E+00
H ₂ O ₂	200 K - 1000 K	4,209539030E+00	-8,686733430E-05	1,571295717E-05	-2,070225718E-08	8,392987310E-12	-1,769560132E+04	3,716509630E+00
	1000 K - 5000 K	4,503574490E+00	4,241042760E-03	-1,442002270E-06	2,389803041E-10	-1,523628501E-14	-1,798893666E+04	1,056597677E+00

Tabelle D.3: Gefittete Polynome für Idealgas-Viskositäten.

Spezies	Temperaturbereich	a_0	a_1	a_2	a_3	a_4
$H_2^{(n)}$	20 K - 4000 K	-2,003392157E+01	3,550202490E+00	-6,809064253E-01	7,136557300E-02	-2,769809999E-03
$H_2^{(p)}$	20 K - 4000 K	-2,003392157E+01	3,550202490E+00	-6,809064253E-01	7,136557300E-02	-2,769809999E-03
O_2	20 K - 4000 K	-1,621898671E+01	2,964576160E-01	3,418812124E-01	-5,493101969E-02	2,654155374E-03
H_2O	260 K - 4000 K	5,849883708E+01	-4,318306118E+01	9,513055608E+00	-8,948147891E-01	3,101689960E-02

Tabelle D.4: Gefittete Polynome für Idealgas-Wärmeleitfähigkeiten.

Spezies	Temperaturbereich	a_0	a_1	a_2	a_3	a_4
$H_2^{(n)}$	80 K - 4000 K	-2,548182053E+01	1,217891440E+01	-2,465242323E+00	2,3055591754E-01	-7,804260690E-03
$H_2^{(p)}$	60 K - 4000 K	-4,580549205E+01	2,596613515E+01	-5,847166249E+00	5,890116046E-01	-2,173144081E-02
O_2	20 K - 4000 K	-1,274186709E+01	2,527945151E+00	-1,909019936E-01	2,662777872E-03	3,836850555E-04
H_2O	260 K - 4000 K	5,925648598E+01	-3,771478891E+01	7,943081611E+00	-7,056497371E-01	2,305599080E-02

E Herleitungen thermodynamischer Gleichungen

An dieser Stelle werden zum besseren Verständnis einige thermodynamische Formulierungen hergeleitet. Auf die Kennzeichnung gemittelter Werte durch \sim und $\bar{}$, wie im CFD-Code verwendet, wird verzichtet. Als erstes wird ein alternativer Ausdruck für die Schallgeschwindigkeit hergeleitet, welcher u. a. für die Präkonditionierung verwendet wird. Dafür wird von der üblichen Definition der Schallgeschwindigkeit ausgegangen:

$$a_s^2 = \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_{s, \{Y_\alpha\}} = \frac{c_p}{c_v} \left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_{T, \{Y_\alpha\}} = \frac{c_p}{c_v} \underbrace{\left(\frac{\partial p}{\partial \rho} \right)_{T, \{Y_\alpha\}}}_{=:\rho_p}. \quad (\text{E.1})$$

Für die Dichte besteht folgende Abhängigkeit vom Druck, der massenspezifischen Entropie bzw. der Temperatur sowie den Massenbrüchen: $\rho = \rho(p, s, \{Y_\alpha\}) = \rho(p, T(p, s, \{Y_\alpha\}), \{Y_\alpha\})$. Die partielle Ableitung ρ_p in Glg. (E.1) kann umgeformt werden in

$$\left(\frac{\partial \rho}{\partial p} \right)_{s, \{Y_\alpha\}} = \frac{1}{a_s^2} = \underbrace{\left(\frac{\partial \rho}{\partial p} \right)_{T, \{Y_\alpha\}}}_{=:\rho_p} + \underbrace{\left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_{p, \{Y_\alpha\}}}_{=:\rho_T} \left(\frac{\partial T}{\partial p} \right)_{s, \{Y_\alpha\}}. \quad (\text{E.2})$$

Mit Hilfe der Dreifach-Produktregel (engl.: triple product rule) und weiterer thermodynamischer Zusammenhänge wie den Maxwell-Relationen (Michelsen und Mollerup (2007) [144]) kann die letzte partielle Ableitung in Glg. (E.2) wie folgt umgeformt werden:

$$\left(\frac{\partial T}{\partial p} \right)_{s, \{Y_\alpha\}} = - \frac{\left(\frac{\partial s}{\partial p} \right)_{T, \{Y_\alpha\}}}{\left(\frac{\partial s}{\partial T} \right)_{p, \{Y_\alpha\}}} = - \frac{- \left(\frac{\partial v}{\partial T} \right)_{p, \{Y_\alpha\}}}{\frac{c_p}{T}} = - \frac{T}{c_p \rho^2} \underbrace{\left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_{p, \{Y_\alpha\}}}_{=:\rho_T}. \quad (\text{E.3})$$

Werden Gleichungen (E.2) und (E.3) kombiniert, so kann die Schallgeschwindigkeit auch folgendermaßen ausgedrückt werden:

$$a_s^2 = \frac{\rho c_p}{\rho c_p \rho_p - (T/\rho) \rho_T^2} \stackrel{\text{iG}}{=} \frac{\rho c_p}{\rho c_p \rho_p + \rho_T}. \quad (\text{E.4})$$

Damit kann die Berechnung des Präkonditionierungsfaktors aus Glg. (4.1.18) vereinfacht werden:

$$\beta = \frac{f_\beta a_s^2}{1 + f_\beta a_s^2 (T/\rho) \rho_T^2 / (\rho c_p)} = \frac{f_\beta a_s^2}{1 + f_\beta (c_p/c_v - 1)}. \quad (\text{E.5})$$

Dabei wurde die mit Gleichungen (E.1) und (E.4) gültige Beziehung

$$\frac{a_s^2 (T/\rho) \rho_T^2}{\rho c_p} = a_s^2 \left[\rho_p - \rho_p + \frac{(T/\rho) \rho_T^2}{\rho c_p} \right] = a_s^2 \left[\rho_p - \underbrace{\frac{\rho c_p \rho_p - (T/\rho) \rho_T^2}{\rho c_p}}_{1/a_s^2} \right] = \frac{c_p}{c_v} - 1 \quad (\text{E.6})$$

ausgenutzt.

Zum Schluss werden in diesem Anhang noch die Einträge der Jakobimatrizen für die Ableitungen der massenspezifischen Totalenergie aus Glg. (4.1.11) hergeleitet. Diese unterscheiden sich für reale Fluide gegenüber den Einträgen für ideale Gase. In den nachfolgenden partiellen Ableitungen werden alle Variablen des primitiven Variablenvektors \mathbf{Q}_p außer der Variable, nach der abgeleitet wird, konstant gehalten. Als Subskripte zur Kennzeichnung konstant gehaltener Variablen werden allerdings nur die thermodynamischen Variablen $(p, T, \{Y_\alpha\})$ aufgeführt und alle Strömungsvariablen $(\{u_\ell\}, K, \omega)$ für eine bessere Übersicht weggelassen. Die partielle Ableitung nach dem Druck lautet dann

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial (\rho e_{\text{tot}})}{\partial p} \right)_{T, \{Y_\alpha\}} &= \left(\frac{\partial (\rho h_{\text{tot}} - p)}{\partial p} \right)_{T, \{Y_\alpha\}} = \\ &= h_{\text{tot}} \left(\frac{\partial \rho}{\partial p} \right)_{T, \{Y_\alpha\}} + \rho \left(\frac{\partial h}{\partial p} \right)_{T, \{Y_\alpha\}} - 1 = \\ &= h_{\text{tot}} \left(\frac{\partial \rho}{\partial p} \right)_{T, \{Y_\alpha\}} + \frac{T}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_{p, \{Y_\alpha\}} = \\ &= h_{\text{tot}} \rho_p + \frac{T}{\rho} \rho_T. \end{aligned} \quad (\text{E.7})$$

Dabei wurde die Beziehung

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial H}{\partial p} \right)_{T, \{n_\alpha\}} &= V - T \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_V \\ \Leftrightarrow \left(\frac{\partial h}{\partial p} \right)_{T, \{Y_\alpha\}} &= \frac{1}{\rho} \left[1 + \frac{T}{\rho} \left(\frac{\partial \rho}{\partial p} \right)_{T, \{Y_\alpha\}} \right] \end{aligned} \quad (\text{E.8})$$

verwendet (Michelsen und Mollerup (2007) [144]). Außerdem sind die partiellen Ableitungen des kinetischen und turbulenten Anteils der Totalenthalpie nach den thermodynamischen

Variablen gleich Null. Die partielle Ableitung nach der Temperatur ergibt sich zu

$$\begin{aligned}
 \left(\frac{\partial (\rho e_{\text{tot}})}{\partial T} \right)_{p, \{Y_\alpha\}} &= \left(\frac{\partial (\rho h_{\text{tot}} - p)}{\partial T} \right)_{p, \{Y_\alpha\}} = \\
 &= h_{\text{tot}} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_{p, \{Y_\alpha\}} + \rho \left(\frac{\partial h}{\partial T} \right)_{p, \{Y_\alpha\}} = \\
 &= h_{\text{tot}} \left(\frac{\partial \rho}{\partial T} \right)_{p, \{Y_\alpha\}} + \rho c_p \\
 &= h_{\text{tot}} \rho_T + \rho c_p
 \end{aligned} \tag{E.9}$$

mit der Definition von $c_p = (\partial h / \partial T)|_{p, \{Y_\alpha\}}$. Zuletzt schreiben sich die partiellen Ableitungen nach den Massenbrüchen als

$$\begin{aligned}
 \left(\frac{\partial (\rho e_{\text{tot}})}{\partial Y_\alpha} \right)_{T, p, \{Y_{\beta \neq \alpha}\}} &= \left(\frac{\partial (\rho h_{\text{tot}} - p)}{\partial Y_\alpha} \right)_{T, p, \{Y_{\beta \neq \alpha}\}} = \\
 &= h_{\text{tot}} \left(\frac{\partial \rho}{\partial Y_\alpha} \right)_{T, p, \{Y_{\beta \neq \alpha}\}} + \rho \left(\frac{\partial h}{\partial Y_\alpha} \right)_{T, p, \{Y_{\beta \neq \alpha}\}} = \\
 &= h_{\text{tot}} \left(\frac{\partial \rho}{\partial Y_\alpha} \right)_{T, p, \{Y_{\beta \neq \alpha}\}} + \rho (\hat{h}_\alpha - \hat{h}_{N_{\text{sp}}}) = \\
 &= h_{\text{tot}} \rho_{Y_\alpha} + \rho (\hat{h}_\alpha - \hat{h}_{N_{\text{sp}}}) .
 \end{aligned} \tag{E.10}$$

Lebenslauf

Persönliche Daten

Name	Martin Janos Seidl
Geburtsdatum	08. Dezember 1986
Geburtsort	Deggendorf
Staatsangehörigkeit	Deutsch

Schulausbildung

Sept. 1993 - Aug. 1997	Grundschule St. Martin II, Deggendorf
Sept. 1997 - Jun. 2006	Robert-Koch-Gymnasium, Deggendorf

Studium

Okt. 2006 - Dez. 2011	Diplomstudium der Luft- und Raumfahrttechnik, Technische Universität München
-----------------------	---

Berufliche Tätigkeit

Jan. 2012 - Okt. 2016	Wissenschaftlicher Mitarbeiter am Deutschen Zentrum für Luft- und Raumfahrttechnik e.V. (Institut für Verbrennungstechnik), Stuttgart
seit Nov. 2016	Entwicklungsingenieur bei Liebherr-Components Deggendorf GmbH, Deggendorf